

307.226
30
1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

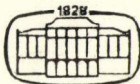
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10-10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

METASTABIL FÁZISOK KELETKEZÉSE, STABILITÁSA ÉS HATÁSA A FIZIKAI TULAJDONSÁGOKRA Al—Zn—Mg ÖTVÖZETEK BEN*

UNGÁR TAMÁS
ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

Bevezetés	2
1. Az Al—Zn—Mg ötvözetek tulajdonságai	3
1.1. Egyensúlyi fázisok	3
1.2. Nemegyensúlyi fázisok	5
1.3. A túltelített szilárd oldat szétesése	6
2. A kisszögű röntgen szórás módszere	15
2.1. Elméleti alapok	15
2.2. Fémekben és ötvözetekben levő inhomogenitások kisszögű röntgen szórása	16
2.3. A kisszögű röntgen szórás intenzitás eloszlásának vizsgálata	18
2.3.1. Az intenzitás eloszlás aszimptotikus viselkedése a kis szögek tartományában	18
2.3.2. Az intenzitás eloszlás aszimptotikus viselkedése a nagy szögek tartományában	19
2.3.3. Az integrális intenzitás	19
2.3.4. Részecskék közötti interferencia	20
2.3.5. Részecskék méreteloszlása és alakja	21
2.3.6. A részecskék összetételének meghatározása	21
2.3.7. A második fázis részecskéi térfogati hányadának meghatározása	23
3. Kísérleti körülmények	23
3.1. Kisszögű röntgen szórás (KRSZ) mérések	23
3.1.1. KRSZ mérések Kratky kamrával	23
3.1.2. KRSZ mérések pont-fókuszú Kiessig kamrával	24
3.2. Szakítóvizsgálatok	25
3.3. Elektromos ellenállásmérés	26
3.4. Hőkezelések	26
4. A szilárd oldat szétesésének folyamata Al—Zn—Mg ötvözetekben	26
4.1. Zónaképződés szobahőmérsékleten [114, 126]	26
4.2. A szobahőmérsékleti zónák összetételének meghatározása [114]	35
4.3. Zónaképződés szobahőmérsékletnél magasabb hőmérsékleteken	39
4.3.1. A szilárd oldat szétesése szobahőmérséklet és 140 °C között az Al—2 at% Zn—1,1 at% Mg ötvözetben [126]	40
4.3.2. A szilárd oldat szétesése szobahőmérséklet és 200 °C között az Al—1,33 at% Zn—2,4 at% Mg ötvözetben [132]	51
5. Szobahőmérsékleten kialakuló GP zónák reverziója	58
5.1. Szobahőmérsékleti GP zónák reverziója az Al—1,33 at% Zn—2,42 at% Mg ötvözetben [135, 136]	59
5.2. A reverzió hatása az η' fázis nukleációjára az Al—1,33 at% Zn—2,42 at% Mg ötvözetben [135, 136]	68
5.3. A reverzió mechanizmusa és hatása az η' fázis kialakulására az alacsonyán ötvöztött Al—Zn—Mg ötvözetekben [141]	69
5.3.1. Reverziós vizsgálatok különböző Zn tartalmú Al—Zn—Mg ötvözeteken	69
5.3.2. A zónaképződés határhőmérsékletének vizsgálata	73
5.3.3. A η' átmeneti fázis képződése	75

* Érkezett 1979. dec. 17.

5.3.4. A reverzió és az η' fázis képződésének kapcsolata	77
5.3.5. A reverzió termodinamikai modellje	80
6. A mechanikai tulajdonságok értelmezése a GP zónák és az η' kiválások szerkezeti paraméterein alapján	83
6.1. A folyáshatár vizsgálata a második fázisú részecskék szerkezeti tulajdonságai alapján ...	84
Összefoglalás	96
Köszönetnyilvánítás	98
Irodalom	98

BEVEZETÉS

A kétkomponensű Al—Zn ötvözetek szinte azonos múltra tekintenek vissza, mint maga az Al fém. Az Al—Mg ötvözetek a századforduló táján kezdtek elterjedni az alumíniumiparban. A Zn-et és Mg-ot tartalmazó, ternér Al—Zn—Mg ötvözetekkel kapcsolatos első vizsgálatok 1913-ból származnak [1]. Mindössze 10 évvel később, *Sander* és *Meissner*, az Al alapú ötvözetek körében kimagaslóan jó mechanikai tulajdonságokat elérve megalapozták ezen ternér ötvözet típus ipari alkalmazását [2]. Ettől az időtől kezdve az ötvözetrendszerrel kapcsolatos kutatások sorozata indult meg, majd minden iparilag fejlett országban, egyre nagyobb ütemben.

Az Al—Zn—Mg kutatás elsődleges hajtóereje az ötvözetrendszer kedvező mechanikai tulajdonságaira vezethető vissza. Ugyanakkor már az ötvözet első gyakorlati alkalmazásaival kapcsolatban ismertté vált a korrózióval szembeni nagyfokú ellenállása, valamint hegeszthetősége. Mindez további lendületet adott mind az alkalmazásnak, mind a kutatásnak. Hamarosan bebizonyosodott azonban, hogy a korrózióval szembeni ellenállóképesség korrózióval szembeni érzékenységgé változik külső terhelés hatására. Ez a jelenség az Al alapú ötvözeteknél a közismert feszültségkorróziós-érzékenység. Ezen utóbbi hatás különösen erőteljessé válik a hegesztési varratok környezetében. Az alkalmazhatóság szempontjából tehát lényeges hegeszthetőség, ill. a korrózióval szembeni ellenállóképesség egyszerre nehezen teljesíthető követelmények. Ugyanakkor tudjuk, hogy az ötvözetrendszernek mind a mechanikai, mind a korróziós tulajdonságai a mikroszkopikus szerkezettel (kiválások méretével, eloszlásával, diszlokáció sűrűséggel, szemcsehatárokkal stb.) szoros kapcsolatban állnak.

A szóban forgó ötvözetrendszerrel kapcsolatos kutatások célja tehát az, hogy részletesen elemezzék az ötvözetben lejátszódó mikroszkopikus folyamatokat. Ugyanis csak ezeknek a pontos ismerete alapján remélhető, hogy a kedvező mechanikai tulajdonságok, a hegeszthetőség és a feszültségkorrózióval szembeni ellenállás egyszerre teljesíthetők legyenek. Egyelőre azonban még számolni kell azzal a lehetőséggel is, hogy a fenti három követelmény egyszerre csak bizonyos kompromisszumok árán valósítható meg.

A gyakorlatban alkalmazott Al—Zn—Mg ötvözetek nemesítési folyamata a homogenizáló és oldó hőkezelést követő edzés után a szobahőmérsékleti hevertetéssel kezdődik. Ilyen alacsony hőmérsékleteken a túltelített szilárd oldat szétesése Guinier—Preston zónák kialakulása révén megy végbe. Valamivel magasabb hőmérsékleteken a túltelítettség az η' átmeneti fázis képződésével szűnik meg, végül még magasabb hőmérsékleteken az egyensúlyi fázisok kialakulása zajlik le. Ezek a folyamatok egymástól nem függetlenek. A különböző metastabil fázisok nagymértékben meghatározzák egy-egy stabilabb fázis részecskéinek eloszlását és ezen keresztül az ötvözet mechanikai és korróziós tulajdonságait.

Bár az utóbbi néhány évtizedben jelentős előrelépések történtek az ötvözetben lejátszódó zónaképződési és kiválásos folyamatok tisztázására, valamint arra, hogy a különböző metastabil részecskék milyen hatást fejtenek ki egymásra a magképződés révén, sok kérdéssel kapcsolatban ellentmondóak az irodalomban található nézetek és vannak szép számban tisztázatlan problémák is.

A jelen dolgozatban az alacsony hőmérsékletű zónaképződést és a zónáknak az η' átmeneti fázis kialakulására gyakorolt hatását, ennek kapcsán a reverzió jelenségét és végül a második fázisú részecskék szilárdságnövelő mechanizmusát fogjuk megvizsgálni.

Az Al és a Zn röntgen sugárzásra vonatkozó szóróképesége közötti viszonylag nagy eltérés lehetővé teszi a kisszögű röntgen szórás módszerének alkalmazását mind a zónák, mind az átmeneti fázisok szerkezeti paramétereinek meghatározására. Jelen dolgozatban döntően ezt a módszert alkalmaztuk az ötvözet típusban lejátszódó folyamatok nyomon követésére.

Az Al—Zn—Mg ötvözetek kutatása terén az utóbbi években gyümölcsöző együttműködés alakult ki az Aluterv—FKI fémfizikai csoportja és az ELTE Általános Fizika Tanszéke között. A jelen dolgozat azokról az eredményekről számol be, amelyekkel szerzője, elsősorban a kisszögű röntgen szórás módszerét alkalmazva, hozzájárult ezen kutatócsoport munkájához.

1. Az Al—Zn—Mg ötvözetek tulajdonságai

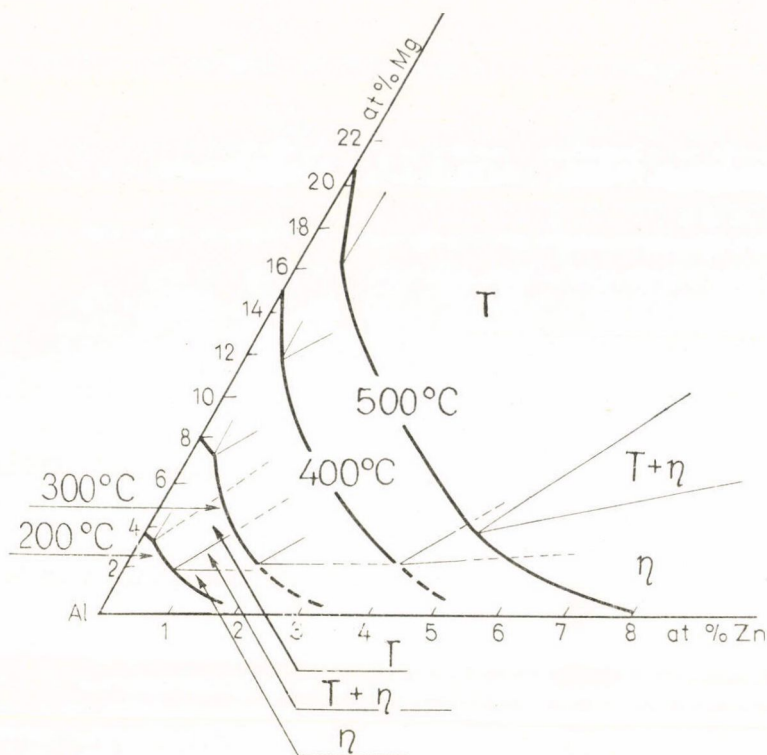
Az Al—Zn—Mg ötvözetrendszer szerkezeti és mechanikai tulajdonságaival kapcsolatban 1971-ben jelent meg *Mondolfo* kitűnő összefoglaló dolgozata [3]. Ebben több mint 600 irodalmi hivatkozás alapján áttekintést ad az ötvözetrendszerben kialakuló egyensúlyi fázisokról, az öntés és megmunkálás közben keletkező nemegyensúlyi fázisokról, valamint a nemesítés és a hegesztés során létrejövő szerkezetekről. Nem sokkal később, 1976-ban jelent meg, ugyancsak *Mondolfo*tól az „Aluminium alloys: structure and properties” című monográfia [4], amely a gyakorlatban alkalmazott Al ötvözetek tulajdonságairól ad áttekintést. Ez utóbbi mű alfejezetként tartalmazza az Al—Zn—Mg ötvözeteket. *Mondolfo* mindkét műve, de különösen az utóbbi a teljességre való törekvés igényével lép fel és így óhatatlanul elveszti azt a lehetőséget, hogy az egyes referenciákat kritikailag adja meg.

A jelen dolgozatban az Al—Zn—Mg ötvözeteknek csak egy szűk csoportjával, ezen belül pedig elsősorban a nemegyensúlyi fázisoknak a nemesítés során történő kialakulásával és korlátozott mértékben ezen ötvözetek mechanikai tulajdonságaival szeretnénk foglalkozni. Ezért a továbbiakban főleg ezekkel a kérdésekkel kapcsolatos irodalmat fogjuk áttekinteni, semmiképpen sem a teljesség igényével.

1.1. Egyensúlyi fázisok

A nemegyensúlyi fázisok szerkezetének és szerepének megértéséhez ismernünk kell az ötvözetrendszerben kialakuló egyensúlyi fázisokat. Ezért először ezeket tekintjük át röviden.

Az Al—Zn—Mg egyensúlyi fázisdiagramját először *Köster és munkatársai* határozták meg [5, 6]. A későbbiekben ezt számos szerző tovább pontosította [7—10].



1. ábra

A szilárd fázisú egyensúlyi állapotábra Al sarkát az 1. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy eltekintve az extrém kicsiny, illetve extrém nagy Zn/Mg arányoktól, két egyensúlyi fázis alakulhat ki szilárd állapotban.

A kétalkotós MgZn_2 összetételű, η -nak nevezett fázis a Laves típusú hexagonális szerkezetek egyik prototípusa [11, 12]. Elemi cellájában 12 atom van, rácsállandói a következő határok közé esnek: $a=0,516\text{--}0,522\text{ nm}$, $c=0,849\text{--}0,855\text{ nm}$ [13]. A ternér rendszer 1%-nál kevesebb Al-ot képes csak oldatban tartani. Egyensúlyi állapotban éles fázishatárral, inkoherensen illeszkedik az Al mátrixhoz [3].

Az irodalomban T -vel jelölt, háromalkotós egyensúlyi fázis összetétele széles határok között változhat. Mg-tartalma 20 és 35%, Zn-tartalma 65 és 22% között lehet [5, 6, 14]. Összetételét és szerkezetét az $(\text{AlZn})_{49}\text{Mg}_{32}$, vagy az egyszerűbb $\text{Mg}_3\text{Zn}_3\text{Al}_2$ szerkezeti képletek jellemzik [15]. Köbös elemi cellája 162 atomot tartalmaz, rácsparamétere 1,429-től 1,471 nm-ig növekszik a Zn-tartalom növekedésével [14, 15]. Az Al mátrixhoz teljesen inkoherensen, ugyanakkor határozott orientációval illeszkedik [3, 16]. Az alkalmazás szempontjából szóba jövő ötvözetekben heterogén nukleációval és viszonylag magas (200 °C-on, vagy magasabb) hőmérsékleteken keletkezik [16]. Ez utóbbi tulajdonság összhangban van azzal, hogy a T fázis tartománya, amint ez az 1. ábrából kitűnik, viszonylag erőteljesebben beszűkül a hőmérséklet csökkenésével, mint az η fázis tartománya.

Mind az η , mind a T fázis részecskéi, az alpmátrixtól erőteljesen eltérő kristályszerkezetük miatt csak igen nagy kritikus nukleus méret elérése után alakulnak ki (mindez fokozottabban érvényes a T fázisra). Egyensúlyi méretük általában néhány-szor 10 nm-nél jóval nagyobb és elérheti az 1 μm -t. Ennek megfelelően diszperzitásuk nagyon alacsony, így az ötvözet mechanikai tulajdonságai szempontjából nem jönnek szóba. Hatásuk elsősorban a túlóregedésnél jelentkezik, tehát kifejezetten káros.

1.2. Nemegyensúlyi fázisok

Az Al alapú ötvözetek kedvező mechanikai tulajdonságai a kiválásos keményedésre vezethetők vissza [17]. Már a technológiai alkalmazások kezdetén tisztázódott, hogy jó szilárdsági tulajdonságok csak akkor érhetők el, ha a nemesítő hőkezelés hőmérséklete jóval alacsonyabb, mint amelyen az egyensúlyi fázisok kialakulhatnak [18]. (A német nyelvű irodalomban ez a jól ismert „kaltaushärtung” jelensége.) Számos olyan Al alapú ötvözet vált ismertté a 20-as és 30-as években (pl.: Al—Zn, Al—Ag, Al—Cu, Al—Zn—Mg, Al—Mg—Si stb.), amelyek alacsony hőmérsékleti nemesítéssel jó szilárdsági tulajdonságokra tettek szert anélkül, hogy az ismert diffrakciós módszerekkel kiválások keletkezését észlelni lehetett volna [18]. Guinier és munkatársai [19], valamint Preston [20] 100 °C-on hőkezelt Al—Cu minták röntgen egykristály-diffrakciós felvételein diffúz pontokat és vonalakat találtak az Al mátrix Bragg reflexióinak közelében. Guinier megmutatta, hogy ez a diffrakció olyan heterogenitásoktól származik, amelyeknek nincs önálló kristályszerkezetük, a részecskék koherensen illeszkednek a mátrixhoz, ugyanakkor a heterogenitásokon belül az ötvöző atom koncentráció sokszorosa lehet az ötvözet átlagos koncentrációjának [21]. Az ilyen részecskéket felfedezőikről Guinier—Preston v. GP zónáknak nevezték el.

A GP zónákra utaló diffrakciós jelenségek általában egyszerre jelennek meg a jó mechanikai tulajdonságokkal, ami egyértelműen mutatja, hogy az alacsony hőmérsékletű nemesedés a GP zónák kialakulásának tulajdonítható. A GP zónák szerkezeti és termikus tulajdonságainak kutatása az Al—Zn—Mg ötvözetekben az 50-es években indult meg jelentős mértékben.

Közepes, mintegy 80 és 180 °C közötti hőmérsékleteken a túltelített szilárd oldat szétesése az η' -vel jelölt átmeneti fázis kialakulásával megy végbe. A mechanikai tulajdonságok szempontjából ez a fázis ugyanolyan fontos szerepet játszik, mint az alacsonyabb hőmérsékletekre jellemző GP zónák.

Az η' fázis hexagonális szerkezetű, rácsparaméterei a legtöbb szerző szerint $a=0,496$ nm és $c=0,868$ nm [22—24]. Az η' és az η fázisok szerkezete és összetétele nagyon hasonló. Azokban az ötvözetekben, amelyekben az η' átmeneti fázis ki tud alakulni, az η fázis biztosan megjelenik a stabil fázisok között. Szerkezeti hasonlóságuknak megfelelően nagyon valószínű, hogy az η fázis az η' átmeneti fázisból alakul ki [16, 25—29]. Azokban az ötvözetekben, amelyekben $2 < \text{Zn/Mg} < 3$, az η fázis mellett 200 °C-on, vagy annál magasabb hőmérsékleteken kialakul a T fázis is [16, 25, 26, 28, 29].

A T fázisnak megfelelő átmeneti fázist senki nem talált és az $\eta \rightarrow T$ átmenetre sincs közvetlen bizonyíték. Nincs kizárva ugyanakkor, hogy a T fázis nukleációjában mind az η' , mind az η fázisnak van szerepe a megfelelő összetételű ötvözetekben [16, 25, 26, 30, 31].

1.3. A túltelített szilárd oldat szétesése

A nemesíthető Al—Zn—Mg ötvözetekben a túltelített szilárd oldat szétesése alacsony és közepes hőmérsékleteken a legtöbb szerző szerint a következő lépésekben megy végbe [16, 17, 22, 23, 31, 33—35]:

szilárd oldat → GP zónák → átmeneti fázis → stabil fázis.

Ez a szilárd fázisú reakciósorozat azonban a hőkezelés hőmérsékletétől, az ötvözet összetételétől, az oldó hőkezelést követő lehűtés körülményeitől, valamint az ezt követő hőkezelési lépésektől és hőmérsékletétől függően rendkívüli módon elbonyolódhat [16, 17, 22—24, 31—34, 36—76].

Annak érdekében, hogy a későbbiekben világosan lássuk az általunk végzett különböző hőkezelések során lezajló kiválósos folyamatokkal összefüggő tisztázott, vagy tisztázatlan kérdéseket, a következőkben áttekintjük azokat az alapvető elképzeléseket, amelyek az ötvözetrendszer túltelített szilárd oldat állapotának szétesésével kapcsolatban az eddigiekben kialakultak.

Mikrokeményiség és elektromos ellenállás mérések alapján Durer és Köster négy hőmérséklettartományt különböztetett meg az Al—Zn—Mg ötvözetek nemesedésében [77]. Ezek szobahőmérséklettől kiindulva a hőmérséklet növekedésével a következők: növekvő mértékű, majd csökkenő mértékű alacsony hőmérsékletű nemesedés („kaltaushärtung”), magas hőmérsékletű nemesedés, végül az egyensúlyi fázisok durvaszemcsés kiválása. Az ellenállás mérések alapján az alacsony hőmérsékletű nemesedés felső hőmérsékleti hatását 140 °C-nak találták. Ugyanezekből a mérésekből arra következtettek, hogy a GP zónák a zónaképződés kezdeti szakaszán elérik egyensúlyi méretüket és a továbbiakban csak a számuk növekszik. A 4.1. pontban látni fogjuk, hogy a kisszögű röntgen szórás (KRSZ) vizsgálatok éppen a fordítottját támasztják alá.

Az Al—Zn—Mg-ban keletkező GP zónákra vonatkozó első röntgendiffrakciós vizsgálatok Graftól származnak [25—26]. Vizsgálatai szerint a nemesedés mintegy 140 °C-ig zónaképződéssel megy végbe. A zónák az (100) síkokban egymással párhuzamos, Zn-ben feldúsult, illetve Zn-ben szegény rétegekből állnak, amit az (100) szuperreflexiók megjelenése mutat.

Ezekből a vizsgálatokból kiindulva Schmalzried és Gerold egykristály oszcillációs felvételek és kisszögű röntgen szórás (KRSZ) mérések alapján megvizsgálták a szilárd oldat szétesését egy Al—2,6 at%Zn—3,9 at%Mg ötvözetben [16]. Azt találták, hogy már a szobahőmérsékleti hevertetés során megjelennek diffúz, gyenge (100) szuperreflexiók. Ezeket úgy értelmezték, hogy a [001] irányban kialakult a (001) hálózati síkok szuperszerkezete. A (001) síkok váltakozva feldúsulnak Zn, illetve Mg atomokban, így az ellentétes mérethatás miatt a mátrix rácsállandója ebben az irányban változatlan marad [13]. Szobahőmérsékleten a zónáktól származó szuperreflexiók intenzitáseloszlása 4 hónap után sem lesz élesebb, vagy erősebb. 50 °C-on a szuperreflexiók 14 nap után kb. olyanok lesznek, mint szobán 3 hónap után. 100 °C-on 8 óra után a szuperreflexiók mellett gyengén megjelennek az η' hexagonális fázisra jellemző reflexiók is. A szobahőmérsékleten, vagy 50 °C-on hosszú ideig hevertetett mintát 200 °C-on 15 s-ig hőkezelve a szuperreflexiók teljesen eltűnnek, mintha szilárd oldat állapot állna be. Ez az ötvözet típusra oly jellemző reverzió jelensége. A szuperreflexiók eltűnése után élesebben megjelentek az η' fázis reflexiói.

225 °C-on és magasabb hőmérsékleten, a vizsgált ötvözet összetételének megfelelően, az η fázis mellett megjelentek a ternér T fázis reflexiói is. Érdemes megjegye-

gyezni, hogy ezen vizsgálatok szerint az átmeneti fázis és az egyensúlyi T fázis megjelenése ugyanabban az ötvözetben nem zárják ki egymást.

Durer és Köster [77], Graf [25, 26], valamint Schmalzried és Gerold [16] korai vizsgálatai nagyjából tisztázták azokat a fő hőmérséklettartományokat, amelyekben a túltelített szilárd oldat szétesése GP zónák, az η' átmeneti fázis, illetve a stabil η fázis kialakulása révén megy végbe. A későbbi vizsgálatok ezeknek a hőmérséklettartományoknak a pontosabb meghatározását, valamint a második fázisú részecskék nukleációs mechanizmusának tanulmányozását tűzték ki célul. A továbbiakban ezek közül tekintjük át a leglényegesebbeket.

A mikrokeménység növekedés inkubációs idejének mérésével részletes vizsgálatokat végzett Polmear [41, 42] a zónaképződés hatására és a zónák stabilitására vonatkozóan az összetétel függvényében. Az inkubációs idők hőmérséklet- és időfüggését a szokásos TTT diagramban ábrázolva jellegzetes C görbéket kapott. A zónaképződés és az átmeneti fázis képződése két, egymást metsző C görbét eredményezett. A C görbék metszéspontját tekintette Polmear a zónaképződés határhőmérsékletének.

Mint látni fogjuk, az így kapott T_{GP} hőmérsékletek 20–30 °C-kal magasabbak, mint a közvetlen módszerekkel meghatározható értékek.

Polmear szerint adott Mg koncentráció mellett a zónák stabilitása nő a Zn tartalommal, ugyanakkor rögzített Zn tartalom mellett a zónák stabilitása alig változik, ha az Mg koncentráció meghalad egy alsó küszöbértéket. A zónastabilitás ezen tulajdonságát erőteljesen ki fogjuk használni az 5.3. pontban.

Az átmeneti fázis nukleációs mechanizmusát behatóan vizsgálta Embury és Nicholson egy Al—2,46 at%Zn—3,2 at%Mg ötvözetben [26]. Abból indultak ki, hogy a klasszikus nukleációs elméletek, amelyekben a nukleáció sebességét, ill. gyakoriságát döntően a mátrix túltelítettsége szabja meg [78–81], számos jelenség leírására nem alkalmasak egy olyan ötvözetrendszerben, amelyben egy vagy több metastabil fázis kialakulása megelőzheti a stabil fázis képződését. Ezek a jelenségek az Al—Zn—Mg ötvözetekben a következők:

a) ugyanolyan szilárd oldat túltelítettség mellett a második fázisú részecskék diszperzitása nagyon különböző lehet,

b) ugyanez a diszperzitás egy adott ötvözetnél és ugyanolyan hőkezelési ciklus mellett lehet teljesen eltérő egy-egy szemcsében, illetve ugyanazon szemcse esetében a szemcse belsejében és a szemcsehatár közelében (ez utóbbi a kiválás mentes zóna keletkezésének a jelensége, ami az Al—Zn—Mg ötvözetekben igen gyakori [23]),

c) a kiválások diszperzitása igen érzékeny a hűtés sebességére, a mesterséges öregítés előtti, alacsony hőmérsékletű hőkezelés hőmérsékletére és időtartamára, valamint olyan szennyezők jelenlétére, amelyeknek a mennyisége olyan csekély, hogy nem növelik az ötvözet túltelítettségét.

Véleményük szerint a vakanciák játsszák a döntő szerepet a klasszikus nukleációs mechanizmusoktól eltérő jelenségekben. Ennek tisztázására részletes transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálatokat végeztek.

A nemesítés hőmérsékletére történő direkt edzés után részletesen vizsgálták a szemcsehatár menti kiválás mentes zónákat. Megállapították, hogy egy bizonyos ötvöző koncentráció mellett a C_v vakancia koncentrációnak egy C_{kr} értéknél nagyobb-nak kell lenni ahhoz, hogy az η' fázis homogén nukleációval keletkezhesen. A vakancia koncentráció profil a szemcsehatárnál zérus értékről indul és monoton növekszik a szemcse belseje felé. A szemcsehatártól elindulva addig lesz heterogén a nukleáció (és ezzel kiválás mentes ez a tartomány), amíg C_v el nem éri a C_{kr} értéket.

Megszakított edzési kísérleteket is végeztek, amelyek rámutatnak arra, hogy a fenti modell korlátozott érvényű. 465°C -ról 180°C -ra edzett mintákat 1 órás hőntartás után tovább hűtötték 135°C -ra, majd ezen a hőmérsékleten hőkezelték 24 órát. A TEM felvételek nagyméretű, pálcika alakú η kiválásokat mutattak, körülöttük kiválás mentes zónákkal, ugyanakkor a köztes tartományokban sűrű, homogén eloszlású, gömb alakú kivadások jelentek meg. Erre Embury és Nicholson a következő magyarázatot adták. Az η fázis részecskéinek képződésében nem aktivizálódott vakanciák és oldott atomok 135°C -on, a megnövekedett túltelítettség miatt vakancia-szennyező csoportokat hoznak létre homogén eloszlással. Ezek a vakancia-szennyező csoportokon nukleálódnak az η' fázis részecskéi. Ezen a ponton maguk a szerzők is rámutatnak modelljük egy belső ellentmondására. Ugyanis a modell működéséhez a többlet vakancia koncentrációnak 180°C -on meglepően nagy stabilitással kell rendelkeznie, annak ellenére, hogy az a hűtési sebességre nagyon érzékeny. Ugyanezt az ellentmondást tovább mélyíti a következő jelenség. 465°C -ról 180°C -ra edzve és 24 órát hőkezelve durva kiválásos szerkezet képződik. Ugyanakkor szobára edzés után 180°C -on homogén eloszlású kiválásos szerkezet keletkezik. Szerzők úgy vélik, hogy a homogén nukleáció a vakancia-szennyező atomcsoportokon megy végbe. Ezek az atomcsoportok 180°C -on is létrejönnek, csak nem érik el az η képződéshez szükséges kritikus magméretet. A megszakított edzésnél a többlet vakanciakoncentráció az atomcsoportok révén stabilizálódik, amelyek túlélik a 180°C -os hőkezelést és csak 135°C -on aktivizálódnak.

A vakanciák szerepe közismerten nagyon lényeges a szilárd fázisú reakciókban, különösen az olyan hőmérséklettartományokon belül, amelyeket nem metsz át valamilyen fázishatár. Ugyanakkor nem tartjuk valószínűnek, hogy a különböző fázisú tartományokban észlelt különbségek ilyen egyszerűen visszavezethetők lennének a vakanciákra, mint Embury és Nicholson modelljében.

A fázishatárok lényeges szerepét a szilárd oldat szétesésben és a nukleáció mechanizmusában az 5.3. pontban fogjuk részletezni.

Az, hogy a metastabil fázishatároknak legalább olyan lényeges szerepük van, mint a vakanciáknak a második fázisú részecskék nukleációjában és eloszlásában, jól kitűnik Lorimer és Nicholson [39, 43] alapvető munkájából. Ugyanazokat a vizsgálati módszereket alkalmazták, ugyanolyan ötvözetben, mint Embury és Nicholson [26]. A 180°C -ra edzett mintában durva szemcsés kiválásos szerkezet alakult ki. 135°C -ra edzett mintákban homogén eloszlású, finomszemcsés kiválást észleltek. A 150 – 160°C közötti hőmérséklettartományt ebből a szempontból átmeneti jellegűnek találták. Mindebből arra következtettek, hogy ebben az ötvözetben 155°C a GP zónák képződési határa és ezt T_{GP} -nek nevezték.

Érdemes megjegyezni, hogy ez kb. 15°C -kal alacsonyabb, mint amit Polmear mikrokeményiség méréseiből kapott [41, 42].

Lorimer és Nicholson megvizsgálta továbbá a 100°C -ra edzés és ezt követő hőntartás időtartamának hatását a 180°C -on 3 óras hőkezelés során kialakuló kiválásos szerkezetre és kiválás mentes zónákra. Azt találták, hogy a hőntartás időtartamával nő a 180°C -on keletkező kivadások diszperzitása és keskenyebbé válnak a kiválás mentes zónák. A fentiek alapján kidolgozták a nukleáció termodinamikai modelljét [39, 71], amelyről Lendvai János adott nemrég kitűnő kritikai áttekintést [82]. Eszerint a T_{GP} alatti hőmérsékleteken a zónaképződés homogén nukleációval, gyakorlatilag inkubáció nélkül megindul és kialakul egy zónaméret eloszlás, amelynek a d_m maximuma és Δd félérték szélessége függ mind a hőkezelés hőmérsékletétől,

mind pedig időtartamától. A $T_1 < T_{GP}$ hőmérsékleten hőkezelt mintát $T_2 > T_{GP}$ hőmérsékletre helyezve azok a zónák, amelyeknek a mérete egy d_{kr} értéknél kisebb, feloldódnak, amelyekre viszont $d > d_{kr}$, azok a T_2 -n kialakuló fázis magjai lesznek. Mivel d_m monoton nő, T_1 -en a hőkezelés idejével és feltehetően Δd nem nagyon változik, egyre kevesebb zóna oldódik fel T_2 -n és a kiválásos szerkezet diszperzitása monoton nő.

Ugyanez a modell, az előző, Embury és Nicholson modell eredményeit felhasználva jó magyarázatot tud adni a kiválás mentes zónákra is. Eszerint a szemcsehatár közelében, a többlet vakanciák eltűnése miatt, d_m minden pillanatban kisebb lesz, mint a mátrix belsejében. Így a kiválás mentes zóna ott kezdődik, ahol T_1 -ről T_2 -re téve a mintát az adott helyen érvényes d_m először kisebb lesz d_{kr} -nál.

Lorimer és Nicholson termodinamikai nukleációs modellje a többlépcsős hőkezelésekkel kapcsolatos számos kérdésre helyes magyarázatot ad [82]. Vannak azonban olyan jelenségek, amelyeknél a metastabil fázishatárok szerepe erőteljesebbé válik, mint a kritikus zónaméret [75].

A szobahőmérsékleten keletkező GP zónák reverziójával kapcsolatos vizsgálataink célja éppen az lesz (5. fejezet), hogy megállapítsuk a Lorimer—Nicholson modell érvényességi határát az η' típusú részecskék nukleációs mechanizmusában a különböző összetételű Al—Zn—Mg ötvözetekben. Az 5,2 és 5,3 pontokban látni fogjuk, hogy a Lorimer—Nicholson modell csak egy bizonyos, jól meghatározott Zn koncentrációnál nagyobb Zn tartalmú ötvözetek esetében érvényesülhet.

A 135 °C-on végbemenő zónaképződést és η' keletkezést vizsgálta Bardhan és Starke az Al—2,5 at%Zn—0,7, illetve 1,1 at%Mg ötvözetekben [57]. KRSZ, mikrokeménység és nagyszögű pordiffrakciós vizsgálatok alapján megállapították, hogy 0,72 at%Mg esetén 4,3 nm, 1,1 at%Mg esetén pedig 3,3 nm az a kritikus zónasugár, amelynél a zónából az η' képződés megindul. A mikrokeménység növekedése ugyanis két lépcsőben zajlik le és a második lépcső beindulásánál mért zónaméret tekinthető az η' képződés megindulásához tartozó kritikus zónaméretnek. Mint már említettük, a keménységnövekedés kinetikája általában késik a tényleges kiválásos folyamatokhoz képest [43, 66]. Ennek megfelelően a tényleges kritikus zónasugár értékek alacsonyabbak a fenti értékeknél, amint ezt saját vizsgálataink alapján is a 4,3 pontban látni fogjuk.

Részletesen vizsgálta a szilárd oldat szétesését egy Al—2,48 at% Zn—2,26 at%Mg ötvözetben Thackery [37]. Megállapítja, hogy a szilárd oldat szétesése az Al—Zn—Mg rendszerben igen bonyolult folyamat. A sokféle lehetséges metastabil és stabil fázis a hőkezelés módjától függően a legkülönbözőbb kombinációkban előfordulhat. Így nem lehet egyetlen, egységes nukleációs mechanizmussal leírni a szilárd oldat szétesését. TEM vizsgálatok alapján részletesen vizsgálta az η fázis lehetséges illeszkedését az Al mátrixban. Érdekes módon, diffrakciós felvételekre hivatkozva Thackery azt állítja, hogy az η' fázis nem létezik, ugyanakkor felfedezni vél egy új, általa X fázisnak nevezett kiválást, amelyet 165 °C-on 120 óráos hőkezelés után talált. Az X fázis szerkezetét nem sikerült meghatározni, de azt sikerült megállapítani, hogy kb. 135 és 195 °C között nukleálódik és mintegy 290 °C-ig stabil. Egy helyen megjegyzi, miszerint nincs kizárva, hogy az η' és az X fázisok nem különböznek egymástól lényegesen. Az X fázisnak mindenesetre nagyon jellegzetes diffrakciós képe van, amit mi is megtaláltunk egy 4,5 at%Zn—3 at%Mg tartalmú Al—Zn—Mg ötvözetben 160 °C-ra történő edzés és hőkezelés után [83]. Az X fázis létezését más szerzők is megfigyelték [84].

Sötétlátóterű TEM és elektrondiffrakciós felvételek alapján behatóan vizsgálták az η' fázis szerkezetét és nukleációs körülményeit *Gjønnes* és *Simensen* [59]. A sötétlátóterű képek azt mutatták, hogy az η' részecskék az $\{111\}_{\text{Al}}$ mentén fekvő lemezek. Nem találtak direkt bizonyítékot arra, hogy az η' képződés GP zónákon keresztül történne. Ugyanakkor az $\eta' \rightarrow \eta$ átmenetet jól megalapozott szilárd fázisú reakciónak vélik.

Alapvető munkát végzett *Kawano*, *Murakami*, *Nakazawa* és *Liu* a szilárd oldat szétesésére vonatkozóan szobahőmérséklet és 260°C között egy $\text{Al}-2,8\text{ at\%Zn}-1,32\text{ at\%Mg}$ ötvözetben kis és nagy szögű röntgendiffrakciós és TEM vizsgálatok alapján [60]. Szobahőmérsékleten 3 és 45 nap után az oszcillációs egykristály felvételek nagyon gyenge (100), (300) stb. szuperreflexiókat mutattak a szobahőmérsékleti (valószínűleg rendezetlen) GP zónáknak megfelelően, egyezéskben *Schmalzried* és *Gerold* eredményeivel [16]. 80°C -on 3 nap után rendezett GP zónáknak megfelelő gyenge szuperreflexiók jelentek meg az η' fázis nagyon gyenge reflexióival és diffúz vonalaival együtt, 80°C 21 nap után a GP zónák szuperreflexiói nem változtak, ugyanakkor az η' reflexiói és diffúz vonalai erősödtek és élesedtek. Az átlagos részecskesugár szobahőmérsékleten 45 nap alatt $1,5\text{ nm}$ -t, 80°C -on 21 nap alatt $3,0\text{ nm}$ -t ért el.

135°C -on a zónák szuperreflexiói nem jelentek meg, viszont az η' fázis reflexiói és diffúz vonalai minőségileg azonosak voltak a 80°C -on megfigyelhetővel. 180°C -on az η' diffúz vonalai eltűntek és csak diffrakciós maximumok maradtak meg gyengén, ugyanakkor megjelentek az η fázis éles reflexiói.

A fentiek alapján *Kawano* és munkatársai a következő hőmérséklethatárokat állapították meg. 115°C alatt a szilárd oldat szétesése GP zónák képződésével indul meg. Szobahőmérsékleten a zónaképződéssel be is fejeződik ez a folyamat (a vizsgált kb. 2 hónapos időtartamon belül). 80°C -on a zónaképződést az η' átmeneti fázis követi, bár lényeges, hogy zónák és η' részecskék együtt is jelen vannak a mintában. 115°C felett nincs zónaképződés, de az η' nukleációja még mindig homogén nukleációval megy végbe. A 115°C -os hőmérséklet határ tehát a GP szolvuszt jelenti. Az η' fázisra vonatkozó koherens fázishatár a vizsgált ötvözetben 170°C . 170°C fölött tehát az η' nukleációja heterogén, alacsonyabb hőmérsékleteken viszont homogén. Direkt edzési kísérleteik azt mutatták, hogy ilyen esetben az említett két határhőmérséklet valamivel magasabbnak adódik.

Eredményeik alapján a kétlépcsős hőkezelésekre a következő modellt állították fel. Jelöljük az első lépcső hőmérsékletét T_1 -gyel, a másodikét T_2 -vel, a GP szolvuszt T_{GP} -vel és a koherens fázishatár hőmérsékletét T_{HH} -val. A kétlépcsős hőkezelések három esetét különböztetik meg.

1) $T_1 < T_{\text{GP}}$ és $T_{\text{GP}} < T_2 < T_{\text{HH}}$: ilyenkor az első lépcsőben GP zónák képződnek, amelyek a második lépcsőben részleges reverzió után viszonylag nagy diszperzitású kiválások szerkezetet eredményeznek.

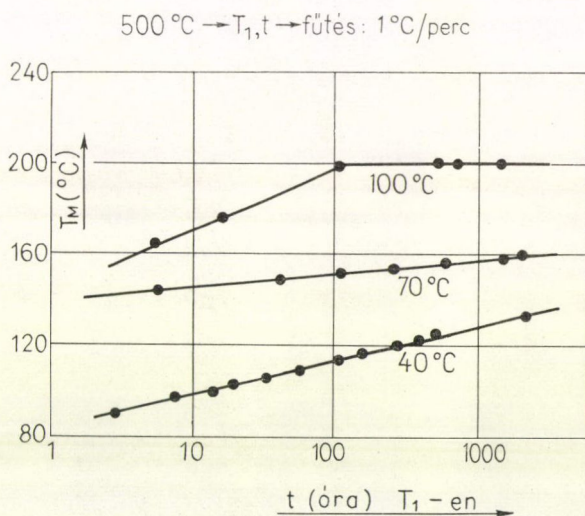
2) $T_1 < T_{\text{GP}}$ és $T_{\text{HH}} < T_2$: az első lépcső azonos az előzővel, a második lépcsőben gyakorlatilag teljes reverzió után igen nagy diszperzitású kiválások szerkezet keletkezik.

3) $T_{\text{GP}} < T_1 < T_{\text{HH}}$ és $T_{\text{HH}} < T_2$: az első lépcsőben η' képződik lényegesen kisebb diszperzitással, mint a GP zónák (annak ellenére, hogy T_1 a koherens tartományon belül van), így a második lépcsőben sem alakul ki finom szemcsés kiválások szerkezet. A 2) típusú hőkezelést tekintik a mechanikai tulajdonságok szempontjából a legjobbnak.

Saját vizsgálataink ezzel teljes összhangban vannak, amint ezt a 6. fejezetben látni fogjuk.

Végül megjegyezzük, hogy Kawano és munkatársai az alacsony hőmérsékleteken keletkező zónákban a Zn/Mg arányt 1:1-nek feltételezték. A zónák összetételére vonatkozó részletes vizsgálataink (4.2. pont) ezzel szemben azt mutatták, hogy a szóban forgó ötvözetben a zónák Zn tartalma 42 at% és Mg tartalma mintegy 20 at%.

Az alacsony és közepes hőmérsékleteken keletkező második fázisú részecskék termikus stabilitását, mennyiségét és bizonyos fokig típusát vizsgálták Hirano és munkatársai kalorimetrikus módszerrel [31, 51, 62, 66]. Szobahőmérséklet és 160 °C között különböző ideig hőkezelt mintákat 1 °C/perc sebességgel fűtöttek fel adiabatikus kaloriméterben. Az első reakciókból az előzetes hőkezelés közben keletkező fázisra következtettek. Számos eredményük közül nézzünk meg egy igen figyelemre méltót. Az Al—6 s% (MgZn₂) ötvözetben megvizsgálták az első endoterm reakció T_M csúcshőmérsékletének egy adott előregedési hőmérséklet időtartamától való függését. Eredményeiket a 2. ábrán tüntetük fel. Látható, hogy T_M monoton növekszik.



2. ábra

szik 40 és 70 °C-os előregítés után a vizsgált 125 napos időtartam alatt. A 70 °C után kapott T_M értékek mindvégig magasabbak a 40 °C-hoz tartozó értékeknél, ugyanakkor 70 °C után T_M növekedése lassúbb, mint 40 °C után. A 100 °C-os előregítés után T_M kb. 100 óránál telítésbe megy és konstans marad a hosszabb előregítések után. Ezek a vizsgálatok azt mutatják, hogy a zónák termikus stabilitása a hőmérséklettel és idővel monoton növekszik (100 °C-on 100 óráig). 100 °C-on 100 óra után a telítődés arra utal, mintha itt a zónaképződés befejeződne.

Hasonló jellegű hőkezelések után végzett KRSZ vizsgálataink azonban azt mutatták (amint ezt a 4.2. pontban részletesen látni fogjuk), hogy 100 °C-on hosszú idő után olyan típusú GP zónák keletkeznek, amelyeknek a termikus stabilitása nagymértékben megnövekszik és az η' részecskébe történő átalakulást nem előzi meg

számottevő reverzió. A Hirano és munkatársai által észlelt telítődés tehát egy bizonyos termikus stabilitás elérését mutatja, nem pedig a zónaképződés befejeződését.

A zónaképződés hőmérsékletfüggését vizsgálta elektromos ellenállás mérésével Ceresara és Fiorini az Al—2,08 at%Zn—1,1, illetve 3,74 at%Mg ötvözetekben [65]. Mintegy 100—120 °C alatt találtak ellenállásnövekedést, amiből arra következtettek, hogy a vizsgált ötvözetekben ez a GP szolvusz hőmérséklete, egyezésben Cornish és Day hasonló ötvözetben kapott eredményeivel [84]. Ceresara és Fiorini két különböző Mg tartalmú ötvözetben tapasztalt, gyakorlatilag azonos ellenállás kinetikák alapján megállapítják, hogy a zónaképződést az 1,1, illetve 3,7 at%Mg-beli különbség nem befolyásolja észrevehetően. Ezt a megállapítást az 5.3. pontban szeretnénk erőteljesen kihasználni.

A GP szolvusz hőmérsékletét, T_{GP} -t határozták meg Suzuki, Kanno és Asami az Al—(1,4—3,6 at%Zn)—(1,4—3,5 at%Mg) összetétel tartományban egy 10 tagból álló ötvözetsorozaton elektromos ellenállás, mikrokeménység és TEM vizsgálatok alapján [63, 64]. A különböző ötvözetekben T_{GP} -t 86 és 153 °C közöttinek találták, ami 30—35 °C-kal alacsonyabb Polmear klasszikus eredményeinél [41, 42]. Mint említettük, a mikrokeménység bizonyos mértékben késik a mikroszkopikus folyamatokhoz képest. A részecskéknek el kell érni egy bizonyos térfogati hányadot ahhoz, hogy a minta keménysége észrevehetően megváltozzon. Ugyanez a jelenség az ellenállás változást nem érinti. Ennek tulajdonítható, hogy Polmear T_{GP} értékei magasabbak, mint Suzuki és munkatársaiéi.

Az utóbbi évek egyik legalapvetőbb munkája az ötvözetrendszerrel kapcsolatban Dünkeloh, Kralik és Geroldtól származik [67]. Döntően KRSZ mérések alapján megvizsgálták a szilárd oldat szétesését, a reverziót, valamint a zónák összetételét egy Al—(Zn₂Mg) kvázi binér ötvözet sorozaton. Az R átlagos részecskesugár növekedését különböző hőmérsékleteken $\log t$ szerint ábrázolva azt találták, hogy $R \approx 2$ nm-nél az R növekedése erőteljesen felgyorsul, különösen a 4 at%Zn—2 at%Mg tartalmú ötvözetben. Ezt úgy értelmezik, hogy ennél a töréspontnál indul meg a GP zóna $\rightarrow \eta'$ átalakulás. A 2 at%Zn—1 at%Mg ötvözetben a töréspont 80 °C-on 16 óránál és $R \approx 1,4$ nm-nél, 100 °C-on 10 óránál és $R \approx 1,5$ nm-nél található. Ez utóbbi eredmény nincs összhangban az előbbivel, amit arra vezetnek vissza, hogy az alacsonyabb ötvözött mintában a térfogati hányad nagyon kicsi és így az η' magképződése más mechanizmussal megy végbe. Ezt a kérdést a 4.3. és 5.3. pontokban fogjuk részletezni.

Szobahőmérsékleten hosszú ideig hevertetett mintákat 20 °C-os lépésekben, egy-egy hőmérsékleten 3-3 percig tartva felfűtöttek és közben folyékony N_2 hőmérsékleten KRSZ alapján meghatározták az átlagos részecskeméretet és a megmaradó részecskék KRSZ-ának integrális intenzitását. A 2 at%Zn tartalmú ötvözetben a szobahőmérsékleti zónák 140 °C-on 100%-osan revertálódtak. A 3 at%Zn tartalmú ötvözetben 150 °C-on kb. 20%-os reverziót találtak, végül 4 at%Zn tartalom esetén reverziót nem észleltek. A reverzió mértékét az átlagos részecskesugárral összehasonlítva megállapították, hogy ha $R \lesssim 2$ nm, akkor a részecskék nem revertálnak, hanem átnőnek az η' fázisú kiválásokba.

A 4.3. pontban meg fogjuk mutatni, hogy a részecskesugár változásával egyben a részecske típusa is változik, ami további adalékot szolgáltat a reverzió megértéséhez.

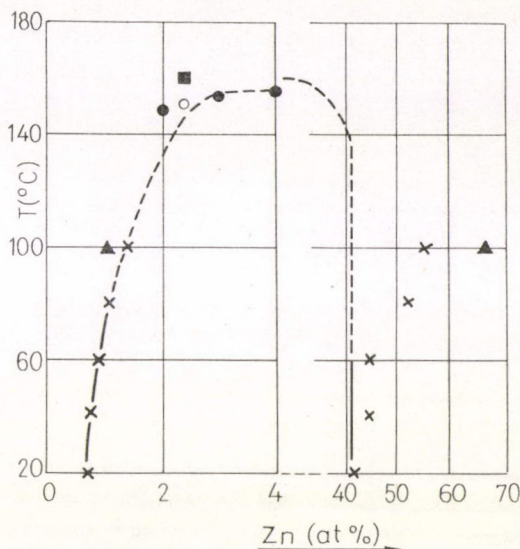
Az Al—(Zn₂Mg) kvázi binér összetétel mentén (a 2.3.6. pontban részletezendő módszer alapján) Kralik és munkatársai meghatározták a zónák Zn tartalmát.

Eredményeiket a háromalkotós fázisdiagram egy kvázi binér síkmetszetében foglalták össze, amit a 3. ábrán tüntettünk fel. Látható, hogy kb. 60 °C-ig a zónák x_1 Zn tartalma mintegy 41 at%. Az ábrából kitűnik, hogy 60 °C fölött x_1 növekszik. Ez, mint ahogy ezt a szerzők maguk is megjegyzik, termodinamikailag nem lehetséges, hacsak nem arról van szó, hogy még egy metastabil fázis is keletkezhet ilyen hőmérsékleteken. Szerzők úgy vélik, hogy ilyen hőmérsékleteken az η' képződése is megindul és ez okozza, hogy a mért x_1 értékek a nagyobb Zn tartalom felé tolódnak el. A 4.3.1. pontban látni fogjuk, hogy 60 °C fölött a 2 at% Zn—1,1 at% Mg tartalmú ötvözetben két különböző típusú GP zóna keletkezik. (A magasabb Zn tartalmú ötvözetekben ezeket a vizsgálatokat a közeljövőben tervezzük elvégezni.) Az integrális intenzitás megfelelő szétválasztásával csökken a GPI-nek megfelelő redukált integrális intenzitás (lásd 2.3.6. pontot), ami az x_1 csökkenéséhez vezet.

A GP zónák összetételével kapcsolatosak Tomita és munkatársai kis és nagy szögű röntgendiffrakciós eredményei [68]. 0,06 és 2 at% közötti különböző Mg és 6,8 at% Zn tartalmú Al—Zn—Mg ötvözeteken megvizsgálták az (111) Bragg reflexió két oldalán a zónaképződés során kialakuló oldalonaknak a Mg tartalomtól való függését. Azt találták, hogy kb. 0,65 at%-nál nagyobb Mg tartalom esetén az oldalonak semmilyen hőmérsékleten nem jelennek meg. Ez csak úgy érthető, hogy

a Zn és Mg ellentétes mérethatása következtében [85] a Mg beépülése a zónákba megszünteti a Zn atomok okozta ráctorzulásokat. Ebből azt a következtetést vonják le, hogy az ötvözet Mg tartalmának növekedésével nő a zónák Mg tartalma is. Ezt a kérdést a 4.2. pontban részletesen fogjuk elemezni.

Az η' fázis nukleációs mechanizmusát vizsgálta Ryum mikrokeménység mérés és TEM felvételek alapján egy Al—2,4 at% Zn—1,2 at% Mg ötvözetben [69]. Az ezzel kapcsolatos korábbi elképzelésekhez képest modelljében új vonás, hogy feltételezi egy nagyon kis méretű, ötvöző-vakancia-csoport keletkezését, ezt „mag”-nak nevezi, amely az edzés során vagy az edzés pillanatában jön létre. Ezek a „magok” szoba-hőmérséklet környezetében konzerválódnak és csak magasabb hőmérsékleten, 150—



GP zónák metastabil fázishatára az Al—Zn₂Mg kvázi-binér metszetben:

- x képződésből } Dünkeloh és mtsi [67]
- reverzióból }
- Lorimer és Nicholson [43]
- Polmear [41, 42]
- ▲ η' fázishatára [67]

3. ábra

160 °C körül aktivizálódnak az η' fázis magjaiként. Ezek alapján Ryum szerint a szilárd oldat szétesése a következő szilárd fázisú reakciók révén megy végbe:

α) szilárd oldat $\rightarrow \eta'$

β) szilárd oldat \rightarrow „magok” $\rightarrow \eta' \rightarrow \eta$,

γ) szilárd oldat \rightarrow GP zónák $\rightarrow \eta' \rightarrow \eta$. Az α reakciónak nagy az aktiválási energiája, ezért csak magasabb hőmérsékleten (150 °C körül) megy végbe. Durva kiválások szerkezetet eredményez, így nem jár keménységnövekedéssel. A β reakció a szobahőmérsékletre történő edzés és azt azonnal követő, 150 °C körüli nemesítés során játszódik le. A γ reakciót Ryum szerint nehéz tisztán megvalósítani, mert minden hőmérsékleten vele együtt lejátszódhat az α vagy a β reakció is. Az itt definiált „magok” hasonló tulajdonságúak az Embury és Nicholson [26], valamint Lorimer és Nicholson [43] által bevezetett atomcsoportokhoz, azzal a különbséggel, hogy a Nicholson modellben az atomcsoportok egyben a GP zónák nukleusai is lehetnek, míg Ryum szerint a „magok”-ból nem lesznek GP zónák. Érdeemes megjegyezni, hogy a szobára edzett, majd azonnal 160 °C-ra helyezett ugyanilyen összetételű mintakon a saját vizsgálataink alapján soha nem sikerült jelentős folyáshatár-növekedést megfigyelniük.

Nagy felbontóképességű TEM segítségével Lyman és Vander Sande tovább finomították a szilárd oldat szétesésére vonatkozó eddigi ismereteket [71]. 2,1 at% Zn—2,2 at% Mg tartalmú Al—Zn—Mg ötvözetet 30—70—100—150 °C-on hőkezelték különböző időtartamokig. 100 °C-on 24 óra után nem észlelték az η' fázis diffrakcióját, azonban a diffrakciós maximum feltételezett helyéről készült sötét látóterű képeken a kiválások egy része világos kontrasztot mutatott. 10 óránál rövidebb 100 °C-os hőkezelés után ez a jelenség még nem volt észlelhető. Eszerint a szilárd oldat szétesése a következő fázisok képződésével megy végbe:

a) gömb alakú GP zónák;

b) gömb alakú, rendezett, hexagonális szerkezetű GP zónák;

c) hexagonális szerkezetű, η' átmeneti fázis;

d) stabil η fázis.

Szobahőmérsékleten csak az a) típusú részecske képződik. Magasabb hőmérsékleteken és hosszabb idők után a b), c) és d) típusú részecskék kiválása észlelhető.

Ugyanezt támasztják alá Brofman és Judd hasonló, nagyfelbontású TEM vizsgálata is [73]. A 4.3. pontban általunk GPI, illetve GPII-nek nevezett zónák valószínűleg az itt definiált a), illetve b) típusú részecskéknek felelnek meg.

Az eddigi irodalmi áttekintésből látható, hogy az ötvözetrendszerrel kapcsolatos nagyszámú kérdés többé-kevésbé tisztázott. Ez részben megkönnyíti, de részben megnehezíti az ötvözetre vonatkozó további kutatásokat. Megkönnyíti azért, mert már eddig is sokat tudunk az ötvözetrendszer viselkedéséről, ugyanakkor megnehezíti, mert csak olyan kérdéseknek a tisztázása maradt hátra, amelyeket eddig, különböző nehézségek miatt nem sikerült megoldani. A jelen dolgozat célja az, hogy néhány ilyen kérdést — elsősorban a röntgen kisszögű szórás módszerének alkalmazásával — tisztázzon és ezzel hozzájáruljon az ötvözetrendszerrel kapcsolatos ismereteink gyarapításához.

2. A kisszögű röntgen szórás módszere

A kisszögű röntgen szórás (KRSZ) módszere és a kísérleti technika adta lehetőségek, illetve korlátok ma már világosan állnak előttünk. Az első KRSZ vizsgálatokat *Krishnamurti* végezte 1930 körül [86]. Felismerte, hogy kolloid oldatok jelentős röntgen szórást eredményeznek a reciproktér origója körül. A szórt sugárzás intenzitáseloszlásából és mértékéből meghatározta a kolloid részecskék átlagos méretét és molekulatömegét. Voltaképpen ezen két mennyiség meghatározása a végső célja ma is minden KRSZ vizsgálatnak.

Krishnamurti felismerését követően a 30-as évek végén nagyobb erővel indult meg a KRSZ vizsgálatok céljaira alkalmas laboratóriumok felállítása, valamint a KRSZ értelmezésével kapcsolatos kérdések tisztázása [86—88].

A KRSZ mind a kísérleti technikában, mind az eredmények értelmezésében rejlő lehetőségek kapcsán széles körű alkalmazást nyert a makromolekulák, a polimerek, valamint a kolloid oldatok kutatása terén [89—92].

Jóval korlátozottabb a KRSZ alkalmazhatósága a fizikai metallurgia területén. Ennek döntő oka abban rejlik, hogy a vizsgálni kívánt inhomogenitások elektronsűrűsége sok esetben nem tér el elegendő mértékben a mátrix elektronsűrűségétől. Ahol azonban ez a korlátozó tényező nem lép fel, ott tág tere van a KRSZ alkalmazásának a fémek és ötvözetek esetében is.

2.1. Elméleti alapok

A röntgendiffrakció kinetikus elméletéből jól ismert, hogy N számú elemi cellából álló kristályról szórt röntgensugárzás intenzitás eloszlása a következő módon írható fel [93]:

$$I_N(\mathbf{s}) = \frac{F_{hkl}^2}{V_e^2} \sum_{hkl} |\hat{\sigma}(\mathbf{s} - \mathbf{r}_{hkl}^*)|^2. \quad (1)$$

A fenti kifejezésben \mathbf{s} a diffrakciós vektor (a kristályra beeső, illetve a kristályról szórt sugárzás irányába mutató egységvektorok különbsége osztva a sugárzás hullámhosszával), \mathbf{r}_{hkl}^* a (hkl) Miller indexű reciproktér rácsvektor, $\hat{\sigma}$ a kristály alakfaktorának Fourier transzformáltja (az alakfaktor a kristály belsejében mindenütt 1, másutt pedig 0), F_{hkl} az elemi cella szerkezeti tényezője az $\mathbf{s} = \mathbf{r}_{hkl}^*$ helyen, végül V_e az elemi cella térfogata. Az (1) egyenletben, a kinetikus elméletnek megfelelően, feltételeztük, hogy $N \gg 1$, így az alakfaktor Fourier transzformáltja csak a reciproktér rácsponthoz közvetlen környezetében különbözik számottevően zérustól.

A kisszögű röntgen szórás (KRSZ) a reciproktér origója körüli röntgendiffrakció. Ennek megfelelően az (1) egyenlet a következő alakban írható:

$$I(\mathbf{s}) = \frac{F^2(0)}{V_e^2} |\hat{\sigma}(\mathbf{s})|^2. \quad (2)$$

Figyelembe véve, hogy a szerkezeti tényező $h=k=l=0$ -hoz tartozó értéke az elemi cellában található elektronok számával egyenlő, a fenti kifejezés az alábbi egyszerű alakot ölti:

$$I(\mathbf{s}) = \varrho^2 |\hat{\sigma}(\mathbf{s})|^2, \quad (3)$$

ahol ϱ a térbeli elektronsűrűség a kristályban. A KRSZ intenzitás eloszlása (IE) tehát a kristály vagy általánosabban a szóró objektum alakfaktorának Fourier transzformáltját, (illetve annak abszolút érték négyzetét) adja meg.

A fenti megfontolásokból látható, hogy a KRSZ intenzitás eloszlását nem befolyásolja sem a szóró objektum szerkezete, sem pedig a részecskén belül meglevő belső feszültségek. Ezek a megállapítások természetesen csak az (1) kifejezésben alkalmazott közelítések érvényességi tartományán belül teljesülnek. Az (1) és (3) kifejezésektől való eltérések azonban általában másodrendűek [90, 93, 94], amelyeknek elemzésére a későbbiekben visszatérünk.

2.2. Fémekben és ötvözetekben levő inhomogenitások kisszögű röntgen szórása

Fémek és ötvözetek KRSZ vizsgálatánál az E_0 energiaáram-sűrűségű primer sugárzás keresztülhalad a lemez alakú mintán. Amennyiben a primer sugárzás körkeresztmetszetű, vékony sugárnyaláb és a detektor ablaka elegendően kicsiny az elhajlás szögéhez képest, úgy a szórt sugárzás energiaáram-sűrűsége a következő alakban írható:

$$E(s) = \frac{I_e}{A^2} n q t e^{-\mu t} E_0 I(s), \quad (4)$$

ahol $I(s)$ a (3) kifejezéssel megadott intenzitás eloszlás függvény elektron/atom egységekben, I_e az elektron szórási hatáskeresztmetszete ($I_e = 7,9 \times 10^{-26} \text{ cm}^2$), a minta és a detektor távolsága, q a detektor ablakának területe, t a minta vastagsága, μ a minta lineáris abszorpciók együtthatója és n az elemi cellában levő atomok száma.

A primer nyaláb és ezzel együtt a szórt sugárzás intenzitásának növelése érdekében a legtöbb KRSZ berendezés vonal fókuszú röntgen csővel, vonal alakú belépő réssel és vonal alakú detektorréssel működik. Ilyen esetben a mintáról szórt sugárzás intenzitás eloszlásában a nyaláb oldalirányú divergenciája miatt egy elkentség (ún. smearing) lép fel. Jól megválasztott réshosszúságok mellett azonban az elkentség matematikailag kezelhető formában jelenik meg [93]. A vonalfókuszú résgometria-hoz tartozó intenzitás eloszlást $J(s)$ -sel jelölve a valódi intenzitás eloszlás és az elkent intenzitás eloszlás között az alábbi integrálegyenlet teremt kapcsolatot [90, 94]:

$$J(s) = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} I(s + \tau) d\tau. \quad (5)$$

A τ_0 értékét a primer nyalábot határoló blende hossza, vagy a detektorrés hossza határozza meg, attól függően, hogy melyik érték nagyobb. $2l$ -lel jelölve ezt a hosszúságot

$$\tau_0 = \frac{l}{A\lambda}. \quad (6)$$

Az esetek döntő többségében a szórt sugárzás centroszimmetrikus és ilyenkor I csak a diffrakciós vektor abszolút értékétől függ. Az (5) integrál egyenlet ebben az esetben az alábbi egyszerűbb formában írható:

$$J(s) = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} I(\sqrt{s^2 + \tau^2}) d\tau. \quad (7)$$

Az irodalomban számos numerikus módszer található, amelynek a segítségével $J(s)$ mért értékeiből meghatározható az $I(s)$ intenzitás eloszlás [93, 95–98]. A fémfizikai alkalmazásokban azonban valamennyi lényeges szerkezeti paraméter közvetlenül megkapható a $J(s)$ intenzitás eloszlás függvényéből, ami szerencsére szükségelenné teszi a fenti integrálegenlet numerikus megoldását.

A KRSZ vizsgálatok számára mind a nagyon kicsiny, mind a nagyon nagy szögek kiesnek a megfigyelés tartományából. Ennek megfelelően a reciproktér 3, viszonylag jól elkülöníthető tartományra osztható:

1) a nagyon kis szögek tartománya,

2) a kisszögű tartomány és

3) a relatíve nagy szögek tartománya. A szokásos röntgen sugárforrásokat és kollimátor rendszereket figyelembe véve, ez három szögtartományt és egyben három mérettartományt jelent a vizsgált mintában levő inhomogenitásokra nézve. Az első a minta méreteivel összemérhető, illetve a $0,1\ \mu\text{m}$ -nél nagyobb inhomogenitásokkal kapcsolatos. A második szögtartományba esik azon elektronsűrűség fluktuációk szórása, amelyeknek az átlagos hossza $0,1$ és $100\ \text{nm}$ közé esik. Ez az ötvözetekben keletkező GP zónák, vagy kiválások mérettartománya. Végül a harmadik szögtartomány az atomi méretű szóróobjektumoknak felel meg és mindig jelen van a szórás-kísérletekben. Ez a szögtartomány természetesen átfedi az előző kettőt is.

Az első szögtartományba szórt I_v térfogati szórás rendszerint beleesik a direkt-sugár-fogóval kitakart szögtartományba. A második szögtartományba eső I_p szórás a KRSZ vizsgálatok szempontjából a leglényegesebb. Tökéletesen homogén, nagyméretű minta esetén (ilyen a homogén szilárd oldat) minden szögtartományban csak a harmadik mechanizmusra jellemző, I_a atomi szórás észlelhető.

A három különböző szögtartománynak megfelelő szórt sugárzás a $\varrho(\mathbf{x})$ térbeli elektronsűrűség eloszlás megfelelő átlagolásával az alábbi módon adható meg [94]:

$$I_i(\mathbf{h}) = \int Q_i(\mathbf{r}) \exp(-j\mathbf{r}\mathbf{h}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

ahol $\mathbf{h} = 2\pi\mathbf{s}$ és i a v , p és a indexeket jelöli. Q_i az elektronsűrűség függvény különböző távolságokra vett kvadrátikus átlagai:

$$Q_v(\mathbf{r}) = \frac{V_a}{V} \int \langle \varrho(\mathbf{x}) \rangle \langle \varrho(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \rangle d\mathbf{x}, \quad (9)$$

$$Q_p(\mathbf{r}) = \frac{V_a}{V} \int [\bar{\varrho}(\mathbf{x})\bar{\varrho}(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - \langle \varrho^2 \rangle] d\mathbf{x}, \quad (10)$$

$$Q_a(\mathbf{r}) = \frac{V_a}{V} \int [\varrho(\mathbf{x})\varrho(\mathbf{x} + \mathbf{r}) - \bar{\varrho}(\mathbf{x})\bar{\varrho}(\mathbf{x} + \mathbf{r})] d\mathbf{x}. \quad (11)$$

$\bar{\varrho}(\mathbf{x})$ az elektronsűrűség eloszlás átlaga az \mathbf{x} hely kis környezetében és $\langle \varrho(\mathbf{x}) \rangle$ a $\varrho(\mathbf{x})$ egész kristályra vett átlaga. A (9)–(11) kifejezésekben az integrálást a minta megvilágított, V térfogatára kell elvégezni, ahol V_a az atomi térfogat.

2.3. A kisszögű röntgen szórás intenzitás eloszlásának vizsgálata

Fémek és ötvözetek vizsgálatánál az esetek jelentős részében a zónák vagy kiválások kristálytani orientációja nem játszik lényeges szerepet. Ilyenkor a KRSZ intenzitás eloszlása csak a diffrakciós vektor abszolút értékétől függ és a következő alakban írható [94]:

$$I(s) = n_p V_a V_p^2 (\Delta\varrho)^2 i_p(s) [1 - \varphi(s)], \quad (12)$$

ahol $\Delta\varrho = \bar{\varrho}_1 - \bar{\varrho}_2$, a zónán vagy kiváláson belüli, illetve a megmaradó szilárd oldat átlagos elektronsűrűségének különbsége (az átlagolást a (10) kifejezésnek megfelelő értelemben néhány atomra kiterjesztve kell elvégezni), n_p a térfogategységben levő részecskék száma és V_p a részecskék átlagos térfogata. $i_p(s)$ az egyetlen részecske által szórt sugárzás átlagos intenzitás eloszlás függvénye, az $s=0$ helyen 1-re normálva. Ez éppen a (3) kifejezésben szereplő alakfaktor Fourier transzformáltja sok részecskére átlagolva [90, 93]. $\varphi(s)$ a részecskék közötti interferencia függvény, amely $s=0$ -nál veszi fel a maximumát és nagy szögeknél zérushoz tart. Ennek a függvénynek jelentős szerepe van, ha a részecskék közötti távolság összemérhetővé válik az átmérőjük néhányszorosával [90].

Vonalfókuszú kamrageometria esetén a (12) kifejezés a következő módon írható fel [94]:

$$J(s) = n_p V_a V_p^2 (\Delta\varrho)^2 j(s) [1 - \Phi(s)], \quad (13)$$

ahol j_p jelentése ugyanaz, mint i_p -é vonalfókuszú kamra esetén. Az i_p és j_p , illetve $i_p\varphi$ és $j_p\Phi$ függvények között a (7) egyenlet teremt kapcsolatot.

2.3.1. Az intenzitás eloszlás aszimptotikus viselkedése a kis szögek tartományában

Guinier megmutatta, hogy a szórt sugárzás $i_p(s)$ intenzitás eloszlás függvénye, függetlenül a részecskék alakjától az alábbi exponenciális függvénnyel írható le [21]

$$i_p(s) = \exp(-R_G^2 4\pi^2 s^2/3), \quad (14)$$

ahol az R_G ún. Guinier sugár (v. girációs sugár) definíciója a következő:

$$R_G^2 = \frac{1}{V_p} \int_{V_p} r^2 dv, \quad (15)$$

ahol r a részecske különböző pontjainak a részecske súlypontjából kiinduló helyvektora. Az integrálást a részecske V_p térfogatára kell elvégezni.

Az i_p fenti kifejezése jó közelítésnek tekinthető a $2\pi R_G s \lesssim 1,2$ szögtartományban, ami a szokásos 1–5 nm sugarú részecskék esetén viszonylag széles szögtartományban tekinthető [90, 93, 94]. R sugarú, gömb alakú részecskék esetén $R = 1,3 R_G$.

Hosemann [89], Shull és Roess [99], továbbá Luzatti [100] megmutatták, hogy jól beállított résgeometria esetén a $j_p(s)$ intenzitás eloszlás függvény arányos $i_p(s)$ -sel és a következő módon írható:

$$j_p(s) = \frac{\sqrt{3\pi}}{4\pi R_G \tau_0} \exp(-R_G^2 4\pi^2 s^2/3). \quad (16)$$

Belátható, hogy a vonalfókusznek megfelelő $j_p(s)$ eloszlásfüggvény (16) aszimptotikus alakja ugyanolyan jól közelíti az egzakt eloszlásfüggvényt, mint az i_p (14)-ben megadott kifejezése [100].

2.3.2. Az intenzitás eloszlás aszimptotikus viselkedése a nagy szögek tartományában

Az intenzitás eloszlás (kisszögű tartományon belüli) nagy szögekhez tartozó aszimptotikus viselkedését Porod határozta meg [101–103]:

$$i_p(s) = \frac{2\pi S_p}{V_p^2(2\pi s)^4}, \quad \text{ha } 2\pi s R_G \lesssim 2,5, \quad (17)$$

ahol S_p a részecskék átlagos felülete. Porod azt is megmutatta, hogy ez az összefüggés a szóró részecskék alakjától, eloszlásától és sűrűségétől függetlenül mindig teljesül [102, 103]. Vonalfókuszú geometria esetén az intenzitás eloszlás függvény aszimptotikus alakja a következő:

$$j_p(s) = \frac{\pi S_p}{4V_p^2(2\pi s)^3 \tau_0}. \quad (18)$$

A (17) és (18) aszimptotikus formulák segítségével meghatározható a (8) és (11) kifejezésekkel megadott atomi (vagy Laue) szórás, ami az abszolút intenzitás-mérésnél jelentős járulékot adhat a háttérszóráshoz.

2.3.3. Az integrális intenzitás

A szóró részecskék térfogati hányada igen lényeges szerkezeti paraméter a zónásan vagy kiválásosan keményedő ötvözetek mechanikai tulajdonságainak értelmezésénél. Ehhez a szórt sugárzás integrális intenzitását kell meghatározni. A (8) egyenlet integrálja a reciprok tér origója körül az integrális intenzitás, ami a következőképpen írható:

$$Q_p = \int_0^\infty I_p(s) dv_s. \quad (19)$$

Az integrálást elvileg az egész reciprok térre el kell végezni, gyakorlatilag azonban csak addig, ahol az intenzitás zérusra csökken, illetve eléri az atomi szórás szintjét [94].

Kihasználva azt a feltevést, hogy a szórt sugárzás csak a diffrakciós vektor abszolút értékétől függ, az integrális intenzitás az alábbi módon írható:

$$Q = 4\pi \int_0^\infty s^2 I(s) ds, \quad (20)$$

illetve vonalfókuszú geometria esetén [90, 94, 100]:

$$Q = 4\pi\tau_0 \int_0^\infty sJ(s) ds. \quad (21)$$

A (8), (10) és (19) egyenletek alapján Q a következő egyszerű alakban írható, ha feltesszük, hogy a zónák vagy kiválások \bar{q}_1 elektronsűrűsége jól elkülönül a megmaradó szilárd oldat \bar{q}_2 elektronsűrűségétől:

$$Q = (\bar{q}_1 - \langle q \rangle)(\langle q \rangle - \bar{q}_2)V_a, \quad (22)$$

ahol $\langle q \rangle$ az ötvözet átlagos elektronsűrűsége. f -fel jelölve a részecskék térfogati hányadát (22) a következő lesz:

$$Q = f(1-f)(\Delta q)^2 V_a, \quad (23)$$

ahol $\Delta q = \bar{q}_1 - \bar{q}_2$.

Az intenzitás eloszlás lecsengő szakaszának járuléka az integrális intenzitáshoz igen jelentős. Ezt a nehézséget a (18)-ban felírt aszimptotikus viselkedés felhasználásával oldjuk meg. Ezzel (21) a következő módon írható:

$$Q = 4\pi\tau_0 \int_0^{s_0} sJ(s) ds + 4\pi\tau_0 \int_{s_0}^{\infty} sJ(s) ds, \quad (24)$$

ahol s_0 a Porod-féle közelítés tartományának érvényességi határa. s_0 -ig az integrálás numerikusan elvégezhető, a Porod tartományban pedig az aszimptotikus viselkedést kell kihasználni. Ha $s > s_0$, akkor felírhatjuk, hogy

$$J^*(s) = \frac{m}{s^3} + J_a, \quad (25)$$

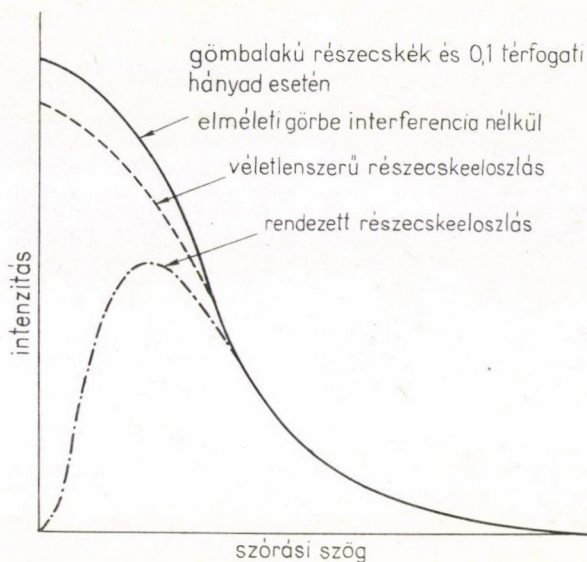
ahol $J^*(s)$ az intenzitás mért értéke, J_a a szögfüggetlen atomi szórás és m állandó. $J(s)$ -et $1/s^3$ függvényében ábrázolva meghatározható m és J_a . Q járuléka a Porod tartományban így a következő lesz, felhasználva, hogy $J(s) = J^*(s) - J_a$:

$$4\pi\tau_0 \int_{s_0}^{\infty} sJ(s) ds = \frac{4\pi\tau_0 m}{s_0}. \quad (26)$$

A fenti kifejezésben mind s_0 , mind m jól meghatározható mennyiségek.

2.3.4. Részecskék közötti interferencia

Az egyes részecskékről szórt sugárzás interferenciája jelentőssé válhat, ha a részecskék közötti távolság összemérhetővé válik az átmérőjükkel [90, 91, 94, 104, 105]. A részecskék közötti interferencia (RKI) fémekben és ötvözetekben azonnal felismerhető abból, hogy az intenzitás a kisebb szögek tartományában lassabban növekszik az exponenciálisnak megfelelő mértéknél [94, 106]. Erőteljes részecskék közötti interferencia esetén az intenzitás eloszlás egy maximumot is mutathat a kisebb szögek tartományában. Amennyiben a részecskék rendezett módon helyezkednek el a mátrixban egymáshoz képest, a részecskék közötti interferencia még erőteljesebben jelentkezik. A 4. ábrán 10% térfogati hányadú részecskék elméleti intenzitás eloszlása látható részecskék közötti interferencia nélkül, illetve rendezetlen, valamint rendezett részecskeeloszlás mellett kialakuló részecskék közötti interferencia esetén.



4. ábra

2.3.5. Részecskék méreteloszlása és alakja

A részecskék méreteloszlása erőteljesen befolyásolhatja az intenzitás eloszlás (IE) függvényt. Általánosságban megállapítható, hogy a kis szögek tartományában az IE-t döntően a nagyobb részecskék, míg a nagyobb szögeknél a kisebb részecskék határozzák meg. A részecskék gömb alaktól való eltérése hasonló hatást gyakorolhat az IE-ra. Ezért, ha akár a részecskék méreteloszlására, akár az alakjukra akarunk kijelentést tenni, a KRSZ-tól független bizonyítékra van szükség, a méreteloszlás vagy a részecskealak hatása mellett ahhoz, hogy a kettő elkülöníthető legyen egymástól [90].

2.3.6. A részecskék összetételének meghatározása

A (23) kifejezésben látható, hogy az integrális intenzitás két egymástól független mennyiséget tartalmaz. Az f térfogati hányadot és $\Delta\rho$ -t, ami a részecskén belüli és a megmaradó szilárd oldat átlagos elektronsűrűségeinek különbsége. Általában mindkettő ismeretlen mennyiség, ezért egyetlen ötvözetten végzett mérésből nem lehet őket meghatározni.

Gerold és munkatársai [94, 108, 109] megmutatták, hogy alkalmasan választott kétkomponensű ötvözetsorozatban meghatározható a részecskék összetétele és térfogati hányada egymástól függetlenül. Mindössze azt a kézenfekvő feltevést kell elfogadni, hogy a túltelített szilárd oldat ugyanolyan összetételű kiválásokra (illetve zónákra) és ugyanolyan összetételű szilárd oldatra esik szét egy adott hőmérsékleten, függetlenül az ötvözetek összetételétől.

Az egyszerűség kedvéért feltételezhetjük, hogy a második fázis részecskéin belül és a megmaradó szilárd oldatban az atomi térfogatok megegyeznek. Ezzel a (23) egyenlet a következőképpen írható:

$$Q = (x_1 - x)(x - x_2) \frac{(Ab)^2}{V_a}, \quad (27)$$

ahol x az átlagos, x_1 a részecskén belüli és x_2 a megmaradó szilárd oldatban az ötvöző-koncentráció, továbbá Ab az ötvöző és az alapfém rendszáma közötti különbség.

Ha az atomi térfogat nem egyezik meg a részecskén belül és a mátrixban, akkor ez a hatás figyelembe vehető a Vegard szabály segítségével és a (27) egyenlet kiegészíthető ennek megfelelően [94]. Gerold [111], valamint Gerold és mtsai [112] részletesen elemezték a Zn és a Mg mérethatását Al—Zn—Mg ötvözetekben lejátszódó alacsony hőmérsékletű zónaképződés során. Vizsgálataik alapján arra a következtetésre jutottak, hogy a mérethatás figyelembevételéből származó korrekciók egyrészt kicsik az integrális intenzitás mérési hibájához képest, másrészt bizonytalanok. Nem lehet ugyanis tudni, hogy a szilárd oldatbeli térfogati mérethatás (ami Zn esetében $\sim -5\%$ és Mg esetében $\sim +41\%$ [85]) hogyan módosul, ha az ötvözőatomok mintegy 40—50 at%-os koncentrációval beépülnek a zónákba. Mindezeket tekintetbe véve a jelen dolgozatban a (27) kifejezés kiértékelésénél eltekintettünk a mérethatás figyelembevételétől.

A (27) egyenletet átrendezve a következő kifejezéshez jutunk:

$$\frac{QV_a}{(Ab)^2} + x^2 = (x_1 + x_2)x - x_1x_2. \quad (28)$$

A (28) egyenlet bal oldalán szereplő ún. redukált integrális intenzitást egy alkalmas ötvözetsorozat egyes tagjainak összetétele függvényében ábrázolva egyenest kell kapnunk. Az egyenes meredekségéből és tengelymetszetéből x_1 és x_2 meghatározhatók.

Ugyanezt a módszert a háromalkotós Al—Zn—Mg ötvözetben keletkező zónák, illetve kiválások Zn tartalmának meghatározására Dünkeloh, Kralik és Gerold [67, 110] általánosították. A zónákon belüli Mg tartalom meghatározására Gerold és munkatársai nagy erőfeszítéseket tettek [111, 112] a grenoble-i Laue—Langevin Intézet neutron kisszögű szórás berendezése segítségével. Technikai jellegű nehézségek miatt azonban csak nagyon durva becslésekre jutottak a zónák Mg koncentrációjára vonatkozóan.

A jelen dolgozat szerzője, munkatársaival együtt [114] jelentős mértékben továbbfejlesztette Dünkeloh, Kralik és Gerold [67, 111] módszerét a háromalkotós rendszerben keletkező második fázisú részecskék összetételének meghatározására. Ennek eredményeképpen nemcsak a zónák Zn tartalmát, hanem Mg koncentrációját is sikerült igen nagy pontossággal meghatározni. Ezen vizsgálatok részleteiről a 4. fejezetben adunk számot.

2.3.7. A második fázis részecskéi térfogati hányadának meghatározása

Az ötvözet átlagos koncentrációja, valamint a második fázisú részecskék és a szétesés után megmaradó szilárd oldat összetételének, x , x_1 és x_2 ismeretében a második fázis részecskéinek f térfogati hányadát a következő kifejezés definiálja:

$$f = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}. \quad (29)$$

Alacsony ötvözőtartalom esetén a fenti kifejezést (23)-ba helyettesítve és a másodrendűen kicsiny tagokat elhanyagolva f -re a következő egyenlet adódik:

$$f = \frac{QV_a}{(\Delta b)^2 (\Delta x)^2}, \quad (30)$$

ahol $\Delta x = x_1 - x_2$.

Az általunk vizsgált ötvözetekben az ötvözőtartalom nem haladja meg a néhány százalékot és így a (29) és (30) kifejezésekből számolt térfogati hányad értékek a mérési hibán belül megegyeznek [114].

3. Kísérleti körülmények

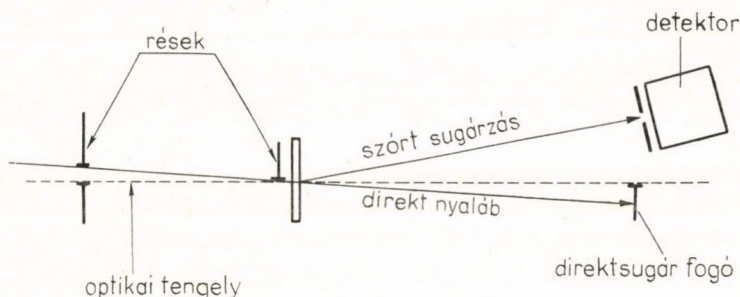
3.1. Kísszögű röntgen szórás (KRSZ) mérések

A kísszögű röntgen szórás méréseket egyrészt egy Anton—Paar gyártmányú Kratky kamrával végeztük, másrészt egy AEG gyártmányú Kiessig [115] kamrát átalakítottunk „in situ” kinetikai mérések céljaira. Mindkét esetben Cu K α sugárzást használtunk 34 kV és 30 mA gerjesztés mellett. A K β vonal kiszűrésére Ni szűrőt és differenciál diszkriminátort alkalmaztunk. A szórt sugárzást Gamma gyártmányú szcintillációs mérő-fejvel detektáltuk. A Kratky kamrában mért intenzitás eloszlásokat a számlálóhoz csatlakozó nyomtatóval, vagy lyukasztóval rögzítettük. A Kiessig kamrában mért kinetikákat, azaz az időben lineáris fűtés vagy hűtés során mért változásokat „rate meter”-hez kapcsolt vonalíróval, illetve a hőmérsékletet is rögzítő x — y íróval regisztráltuk.

A KRSZ vizsgálatokhoz 120 μ m vastagságú, lemez alakú mintákat használtunk. A mintákat a kamrába helyezés előtt 20% perklórsav és 80% metanol keverékében kb. 1 percig elektropolíroztuk. Ezzel az eljárással tökéletesen fémtiszta, oxidmentes felületet kaptunk, amely semmiféle felületi parazitaszórást nem adott a vizsgált szög-tartományban, Parker tapasztalataival összhangban [116].

3.1.1. KRSz mérések Kratky kamrával

A Kratky kamra elvi működése az 5. ábrán látható. Sugárforrásként vonalfókuszos röntgencsővet használtunk. Az első rést 0,08 mm-nek, a minta előtti sugárhatárolót 10 mm-nek választottuk. A detektor előtti rés magasságát 0,10 mm és hosszát 25 mm-nek választottuk. Ezzel jó közelítéssel sikerült megvalósítani az ideális vonalfókuszos geometriai viszonyokat [90, 94, 117].



5. ábra

A detektorkart egy automatika (amelyet *Hajdú Ferenc* és munkatársai dolgoztak ki [118]) előre meghatározott program szerint különböző szöghelyzetbe állította. Egy-egy szöghelyzetben általában 100 sec-ig történt a számlálás. A méréseket $2\theta = 6$ mrad és 80 mrad közötti szögtartományban végeztük 31 vagy 43 pontban. A Hajdú-féle automatika lehetővé tette, hogy a szögtartomány első részében kisebb, a nagyobb szögek tartományában pedig nagyobb lépésközöket válasszunk. Egy-egy intenzitáseloszlás kimérése mintegy 45 percet vett igénybe.

Minden mérés előtt megmértük egy standard Lupolen minta szórását a 15 nm-nek megfelelő szöghelyzetben. Ezzel meg tudtuk határozni a szórt sugárzás abszolút intenzitását [119—121]. Ugyanebben a szöghelyzetben megmértük a Lupolen minta szórását úgy is, hogy a mintát a Ni szűrő elé helyeztük. Az így kapott két beütésszám hányadosa megadta a minta abszorpcióját, ami a szórt sugárzás integrális intenzitásának meghatározásához szükséges.

A röntgen sugárforrás hosszú távú intenzitás-ingadozásából eredő hibákat kiküszöböltük a Lupolen minta szórásának rendszeres mérésével. A sugárforrás rövid távú intenzitás-ingadozása 2%-nál kisebb volt.

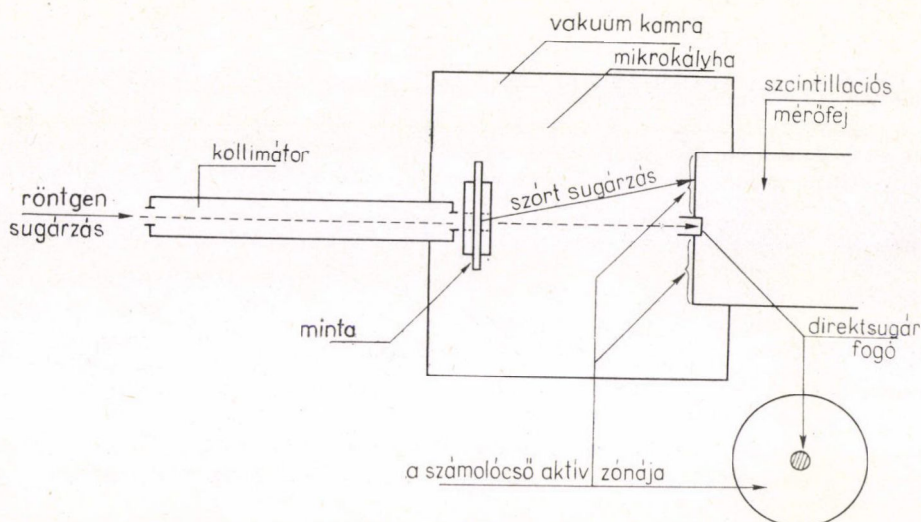
A Kratky kamrában valamennyi mérést szobahőmérsékleten végeztük.

A „step-by-step” módon mért beütésszámokat lyukszalagra vittük, majd az intenzitáseloszlásokat (IE) egy „display” perifériával rendelkező TPA-i számítógépen értékeltük ki.

3.1.2. KRSZ mérések pont-fókuszú Kiessig kamrával

Viszonylag gyorsan lejártszódó folyamatok nyomon követésére eredményes módszernek bizonyult a szórt sugárzásnak aránylag nagy szögtartományban (7-től mintegy 200 mrad-ig) történő detektálása, miközben a mintát „in situ” módon izoterm vagy izokron hőkezelésnek vetettük alá.

Erre a célra *Levelut* és *Guinier* nyomán [122] egy pont fókuszú, Kiessig-típusú, AEG kamrát úgy módosítottunk, hogy a filmtartó helyére egy 25 mm átmérőjű szcintillációs mérőfejet helyeztünk, amelynek csupán a közepét takartuk ki egy 3 mm átmérőjű direktsugár-fogóval. (A kamra elvi működése a 6. ábrán látható.) A mintatartót volframhuzalból készült mikrokályhával szobahőmérséklet és kb. 500 °C között tetszőleges, állandó hőmérsékleten lehetett tartani, vagy egy lineáris



6. ábra

hőfokszabályozó programmal, különböző fűtési, vagy hűtési sebességekkel lineárisan fűteni, illetve hűteni. A hőfokszabályozó pontossága az egész hőmérséklettartományban kb. $\pm 3^\circ\text{C}$ volt. A mintatartó környezetét és a mikrokálya fűtéséhez szolgáló elektromos bevezetéseket cirkuláló vízhűtés védte a felmelegedéstől. Üzem közben a kamra, a mintatartóval együtt vákuum alatt volt.

A minta és a detektor távolságát 62, illetve 220 mm-nek választva, a mintáról szórt sugárzást a 24—200, illetve a 6,7—57 mrad szögterományokban észleltük.

A szcintillációs mérőfej jelét differenciál-diszkriminátoron, számlálón és „rate-meter”-en keresztül $X-Y$ író X tengelyére vittük. A minta hőmérsékletét Ni—NiCr termoelemmel mértük, amelynek termofeszültségét az $X-Y$ író Y csatornájával regisztráltuk. Izoterm mérések esetén az $X-Y$ író helyett vonalírót használtunk. A mikrokálya és a mintatartó kis hőtehetetlensége miatt egy-egy kívánt hőmérsékletet (izoterm mérések esetén) néhányszor 10 sec alatt el lehetett érni.

3.2. Szakítóvizsgálatok

A zónák, illetve kiválások KRSZ segítségével meghatározott szerkezeti paramétereit (zónaméretet, térfogati hányadot) összevetettük a vizsgált ötvözetek mechanikai tulajdonságaival. Ennek érdekében mind a zónaképződést, mind az η' fázis kialakulását néhány esetben nyomon követtük mechanikai tulajdonságok mérésével. Ennek részleteiről a 6. fejezetben számolunk be.

A mechanikai tulajdonságok meghatározására szakító vizsgálatokat végeztünk részben egy FM 250 típusú szakítógéppel, részben egy Instron anyagvizsgáló berendezéssel. A szakításokat $2\text{ mm} \times 0,5\text{ mm}$ keresztmetszetű 100 mm hosszú próbates-

teken végeztük. A szakító diagramok alapján meghatároztuk a 0,2% maradó alakváltozáshoz tartozó mechanikai feszültséget, $R_{p0,2}$ -t.

A szakításokat minden esetben legalább 3 egyformán előkészített mintán végeztük el és az eredmények a 3 mérés átlagaként adódtak. Az $R_{p0,2}$ folyáshatár meghatározás hibája kb. 2% volt.

3.3. Elektromos ellenállásmérés

A szilárd oldat szétesésének jobb megértése céljából néhány esetben a KRSZ vizsgálatokat kiegészítettük fajlagos elektromos ellenállásmérésekkel is.

Az elektromos ellenállásmérésekhez $0,5 \times 2$ mm keresztmetszetű, 120 mm hosszú, lemez alakú mintákat használtunk. A 0,01 mm átmérőjű réz potenciál vezetékeket ponthegeztéssel rögzítettük a mintákhoz. A minták hőkezelését a ráhegeztett potenciálvezetékekkel együtt végeztük el. A minták elektromos ellenállását a szokásos potenciométeres módszerrel folyékony nitrogén hőmérsékleten mértük. A mintán átfolyó mérőáram értéket általában 0,5 A-nek választottuk. Az ellenállás változást így módon $\pm 1 \text{ n}\Omega \text{ cm}$ pontossággal tudtuk meghatározni.

3.4. Hőkezelések

A vizsgált ötvözetek az öntés és a hengerlés között kb. 8 órás homogenizáló hőkezelést kaptak. Ennek megfelelően az oldó hőkezelést valamennyi esetben 480°C -on 30 percig végeztük. Számos tapasztalat azt mutatta, hogy ez elegendő a szilárd oldatállapot eléréséhez [123—125]. A hőkezelést függőleges csőkályhában végeztük, ahonnan a mintákat szobahőmérsékletű vízbe ejtve edzettük.

A minták további hőkezelését ultratermosztátban végeztük. 100°C -nál alacsonyabb hőmérsékletű hőkezeléseknél desztillált vizet, 100°C -nál magasabb hőmérsékletűeknél glicerint használtunk a termosztáláshoz.

Az oldó hőkezelés hőmérsékleti stabilitása ± 2 , az ezt követő folyadékos hőkezelése $\pm 0,2^\circ\text{C}$ volt. A szobahőmérsékleti hevertetést 20 és 24°C közötti, környezeti hőmérsékleten végeztük.

4. A szilárd oldat szétesésének folyamata Al—Zn—Mg ötvözetekben

4.1. Zónaképződés szobahőmérsékleten [114, 126]

A közepes szilárdságú, alacsonyan ötvözött Al—Zn—Mg rendszerben a túltelített szilárd oldat szétesése szobahőmérséklet környezetében GP zónák képződésével megy végbe [22—76]. A Zn és Al atomok szóróképesége közötti viszonylag nagy különbség miatt a zónaképződés folyamata igen jól nyomon követhető a KRSZ módszerével [19—21, 67]. A KRSZ vizsgálatok alapján meghatározható a zónák mérete, mennyisége, valamint diszperzitása. Ezek a szerkezeti paraméterek közvetlenül összevethetők az ötvözetrendszer mechanikai tulajdonságaival és ezzel tanulmányozni lehet az ötvözetrendszer keményedési mechanizmusát. A zónaképződés folyamatának vizsgálatában a KRSZ-nak nagy előnye az elektronmikroszkópiával szemben, hogy

már a 0,5—1 nm sugarú zónák jól észlelhetők, míg a hagyományos elektronmikroszkópos megfigyelések csak az 5—10 nm, vagy ennél nagyobb átmérőjű részecskék megfigyelését teszik lehetővé.

A vizsgált ötvözetek 99,99, vagy ennél nagyobb tisztaságú Al-ból készültek. A minták összetételét az 1. táblázat tartalmazza.

Eltérően az 1—8 ötvözetektől, a 9. ötvözet, a Zn és Mg mellett a következő mikroötvözőket tartalmazza: 0,23 at% Si, 0,17 at% Fe, 0,09 at% Mn és 0,06 at% Ti.

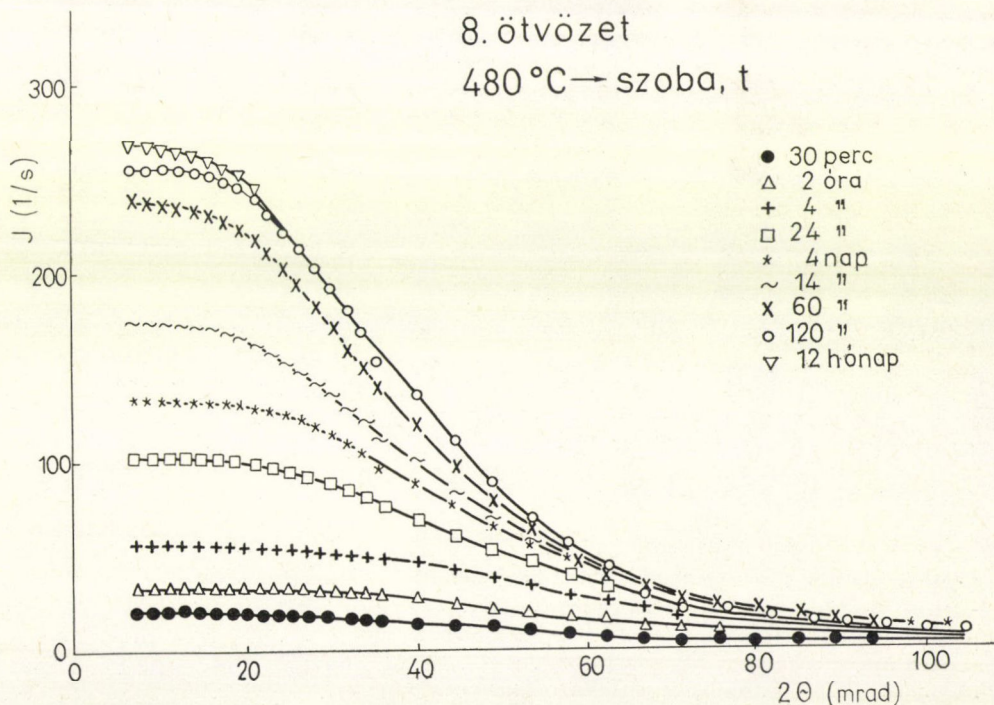
A mintákat 480 °C-os oldó hőkezelés után szobahőmérsékletű vízben edzettük. A felületi oxidréteg eltávolítása után az edzéstől számított 2 percn belül a vizsgált mintát behelyeztük a röntgenkamrába. A minták alacsony ötvöző tartalma miatt a zónaképződés szobahőmérséklet környezetében igen lassú folyamat, ezért az egy-egy intenzitáseloszlás lemeréséhez szükséges, mintegy 45 perc nem okozott különösebb elkentséget a zónaképződés kinetikájának meghatározásánál. Az edzést követő első mérést úgy tekintettük, hogy az a 25—30 per-

1. TÁBLÁZAT

Minta jele	x (Zn) at%	y (Mg) at%
1	2,48	3,33
2	2,48	1,11
3	1,86	1,67
4	1,48	2,78
5	1,48	1,21
6	1,01	0,61
7	1,90	1,11
8	1,96	1,11
9	1,33	2,42

8. ötvözet

480 °C → szoba, t

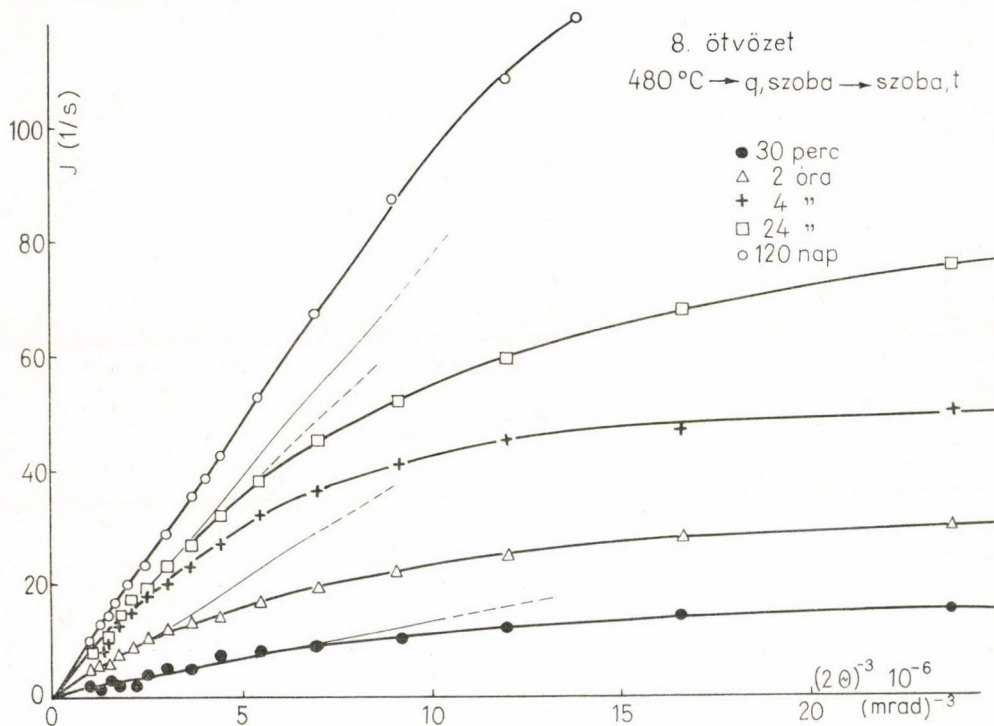


7. ábra

ces szobahőmérsékleti hevertetéshez tartozik. A következő mérést általában 2 vagy 4 órás hevertetés után végeztük el, amelyeknél a mérés időtartama miatti elkentség már nem volt számottevő, bár nem elhanyagolható.

A gyakorlatban alkalmazott két jelentős ötvözet típus a 8 és 9 ötvözetek. A következőkben ezen két ötvözet szobahőmérsékleti viselkedését mutatjuk be.

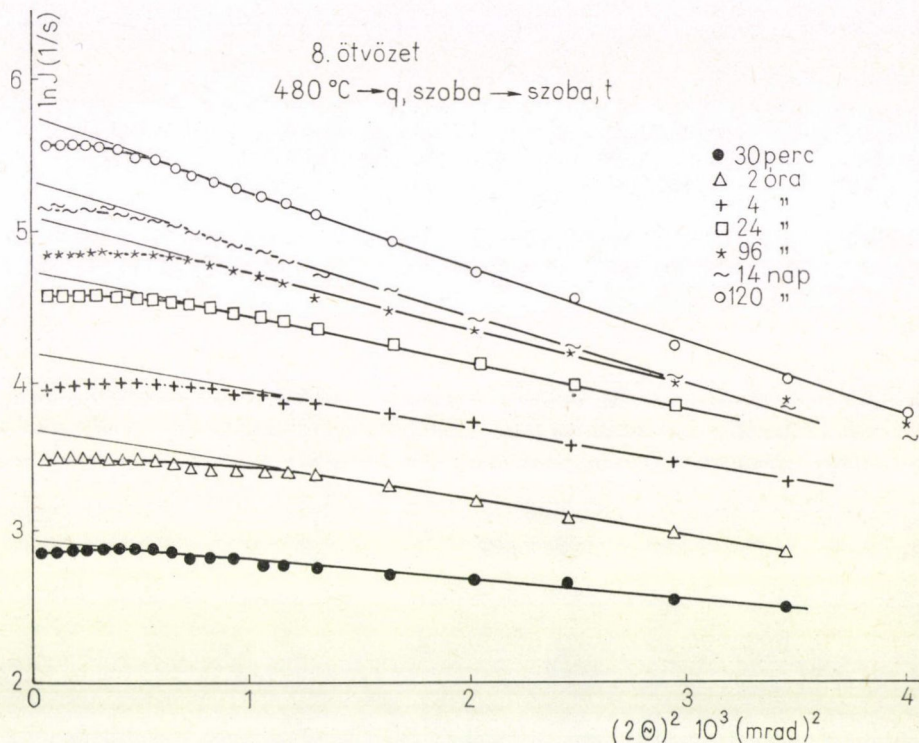
A hevertetés során kialakuló GP zónák kisszögű röntgen szórását a 8 ötvözetre a 7. ábra mutatja. Az intenzitás eloszlásgörbéket a Lupolen etalon mintával abszolút intenzitás skálára hoztuk, majd az instrumentális háttérszórást, valamint az atomi háttérszórást a (25) egyenletnek megfelelően levontuk. Az így korrigált inenzitás-eloszlásokat ábrázoltuk. Látható, hogy a szórt sugárzás intenzitása lényegesen növekszik néhány napos időtartam alatt, ugyanakkor, mintegy 1 hónap után már nem változik jelentősen.



8. ábra

A szórt intenzitás $1/s^3$ szerinti ábrázolása, a (25) egyenletnek megfelelően a 8. ábrán látható. Mivel a mért intenzitás értékekből az atomi szórásnak megfelelő J_a -t már levontuk, természetes, hogy az egyenesek tengelymetszete zérus. A J_a értékek a hevertetés során nem változtak számottevően, ami összhangban van azzal, hogy az alacsony ötvözet tartalom miatt az atomi szórást döntően a mátrix atomok szabják meg. Az ábráról látható, hogy a Porod tartomány határa a hevertetés során kezdetben a nagyobb szögek, majd később a kisebb szögek felé tolódik el.

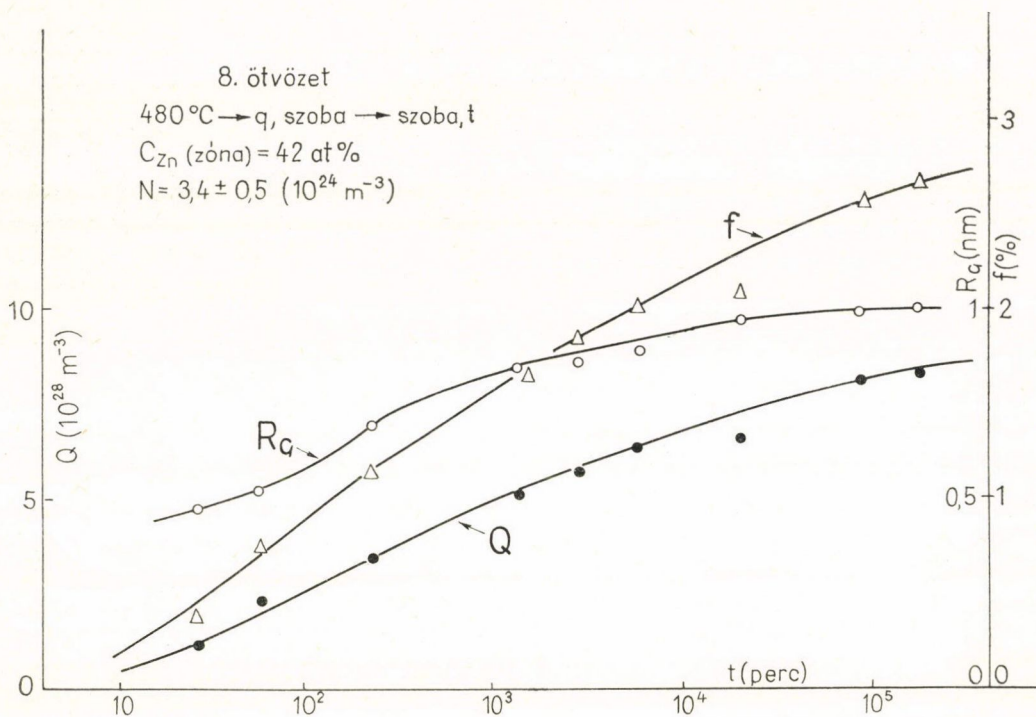
Az intenzitáseloszlások (16) egyenletnek megfelelő Guinier-féle ábrázolását a 9. ábra mutatja. Látható, hogy viszonylag széles szögtartományban jól teljesül a Guinier közelítés, ami arra utal, hogy a zónák közel gömb alakúak [90, 94], összhangban más szerzők eredményeivel [16, 127]. Megfigyelhető ugyanakkor, hogy a kis szögek tartományában a szórt intenzitás a Guinier egyenes alatt marad, bár intenzitásmaximum nem észlelhető. Figyelembe véve, hogy a zónák átlagos távolsága



9. ábra

kb. 10 nm és átmérőjük 0,7 és 2,6 nm között változik, ez a jelenség a részecskék közötti interferenciára utal. Ugyanakkor látható, hogy ez a hatás minőségileg nem változik jelentősen a hevertetés során. Mint látni fogjuk, ez összhangban áll azzal, hogy a zónák száma és ezzel együtt átlagos távolságuk sem változik észrevehetően a hevertetés során.

A zónák Guinier sugarát, a szórt sugárzás integrális intenzitását és a zónák térfogati hányadát a hevertetési idő függvényében a 10. ábra mutatja. A térfogati hányadot a (30) egyenlet alapján határoztuk meg. Amint ezt a 4.2. pontban részletezni fogjuk, meghatároztuk a szobahőmérsékleten hosszú idejű hevertetés során kialakuló GP zónák Zn tartalmát, ami 42 at%-nak adódott [114], jó egyezésben *Dünkeloh*, *Kralik* és *Gerold* [67] hasonló ötvözeteken végzett vizsgálatainak eredmé-



10. ábra

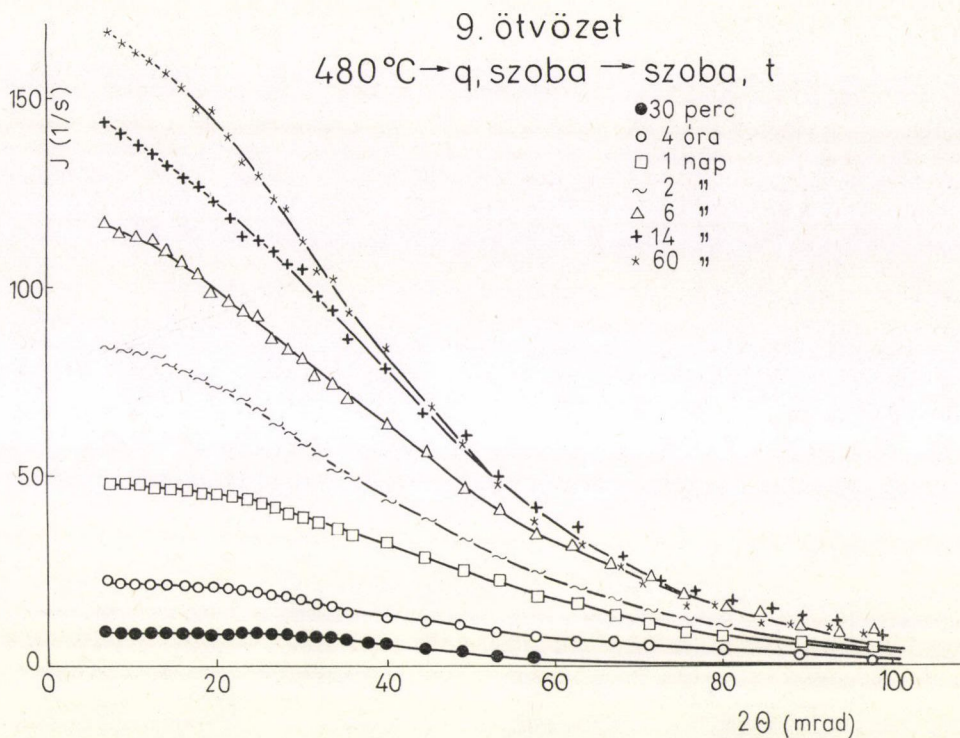
nyeivel. Kézenfekvő feltevés, hogy hosszú idejű hevertetés után a zónák összetétele nem térhet el jelentősen az egyensúlyi zónaösszetételtől [79].

A 10. ábrából látható, hogy mind Q , mind R_G monoton növekszik a hevertetés során és csak hosszú (néhány hetes) hevertetés után csökken a növekedés mértéke. Az N átlagos részecskeszámot az alábbi kifejezés alapján határoztuk meg:

$$N = \frac{f}{9R_G^3}, \quad (31)$$

ahol figyelembe vettük, hogy R sugarú, gömb alakú részecskék esetén $R = 1,3R_G$.

Figyelemre méltó, hogy az átlagos részecskeszám a zónaképződés során állandónak adódott. A zónaképződés nukleációja eszerint az edzés utáni viszonylag rövid, legfeljebb néhány száz 10 perces időtartamon belül végbemegy és a továbbiakban a zónák méretének növekedése a döntő folyamat. Érdeemes megjegyezni ugyanakkor, hogy a zónák szobahőmérsékleten nem nőnek 2,6–2,8 nm átmérőjűnél nagyobbra, ami az itt vizsgált Al–Zn–Mg ötvözetek speciális tulajdonsága. Más ötvözeteken végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy állandó Zn tartalom mellett a Mg tartalom csökkentésével a szobahőmérsékleti egyensúlyi zónaméret monoton nő, mintegy 7,8 nm átmérőig [83, 128].



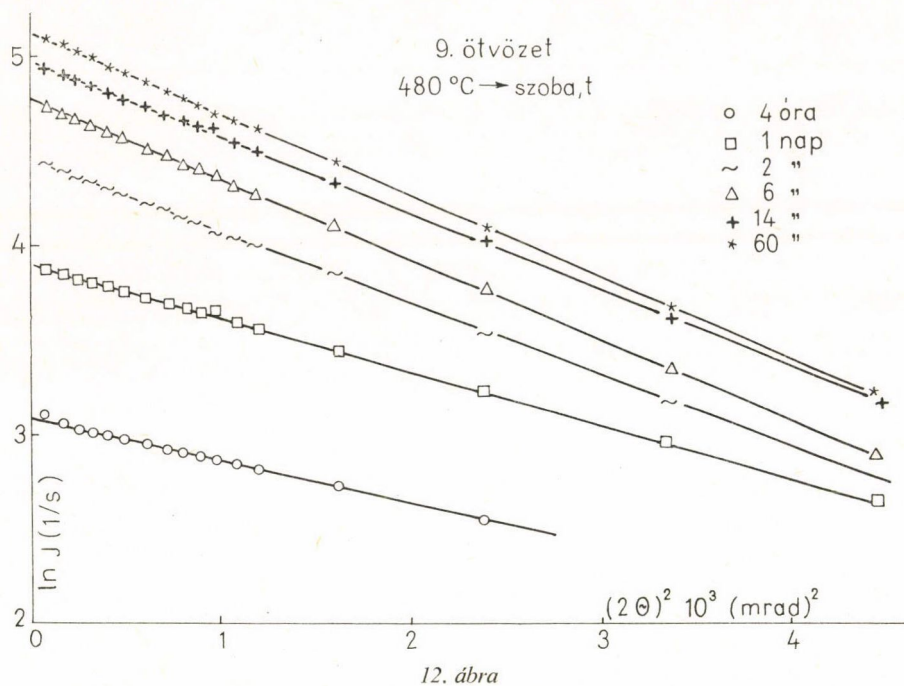
11. ábra

A 9. ötvözet szobahőmérsékleti hevertetése során kapott intenzitáseloszlás görbékét a 11. ábrán tüntettük fel. Itt is megfigyelhető a szórt intenzitás monoton növekedése a hevertetés során. A zónaképződés, a 8. ötvözethez hasonlóan csak hosszú, 1-2 hónapos hevertetés után megy telítésbe. Az intenzitáseloszlások Guinier ábrázolásából (l. a 12. ábrát) látható, hogy a részecskék közötti interferencia nem észlelhető, vagy azt mondhatjuk, hogy ebben az ötvözetben a mérési hibán belül nem lép fel. Ez összhangban van azzal, hogy a 8. ötvözetnél a részecskék átlagos távolsága kb. 10 nm-nek, ugyanakkor a 9. ötvözetnél 14 nm-nek adódott.

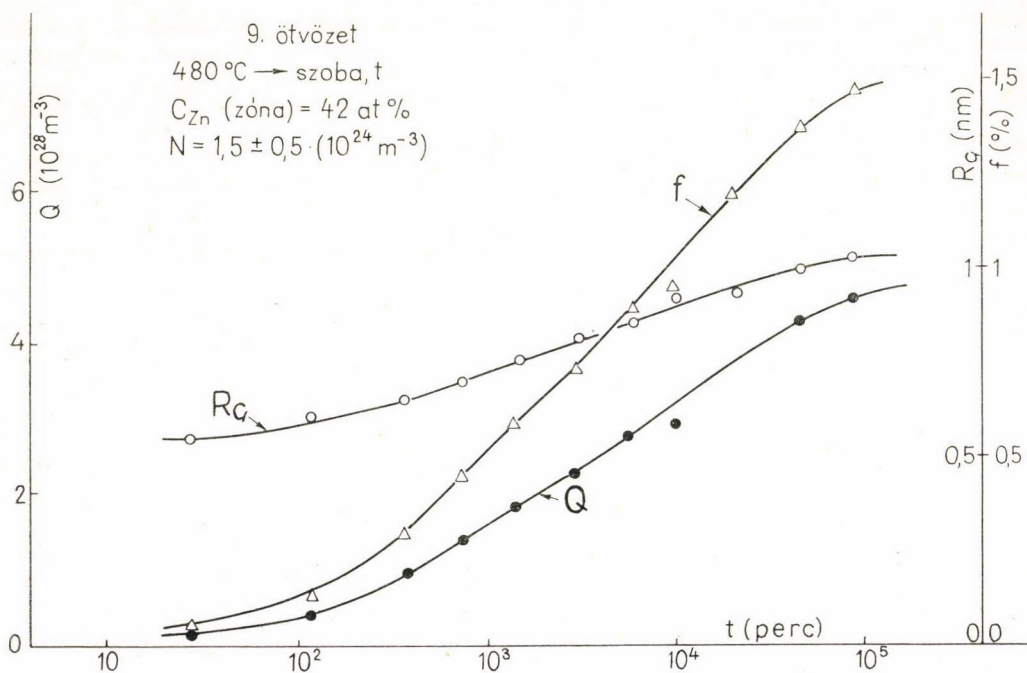
A hevertetés során keletkező zónák Guinier sugarát, a szórt sugárzás integrális intenzitását, valamint a részecskék térfogati hányadát a 13. ábrán szemléltettük. A térfogati hányad meghatározásánál ugyanazokat az elveket követtük, mint a 8. ötvözetnél. Látni fogjuk, hogy a kétféle ötvözetben a szobahőmérsékleti zónák Zn koncentrációja megegyezik.

A zónák átlagos száma ennél az ötvözetnél is állandónak bizonyult a hevertetés során, ami megint azt jelenti, hogy a nukleáció a zónaképződés korai szakaszában végbemegy és ezután a részecskék növekedése a döntő folyamat.

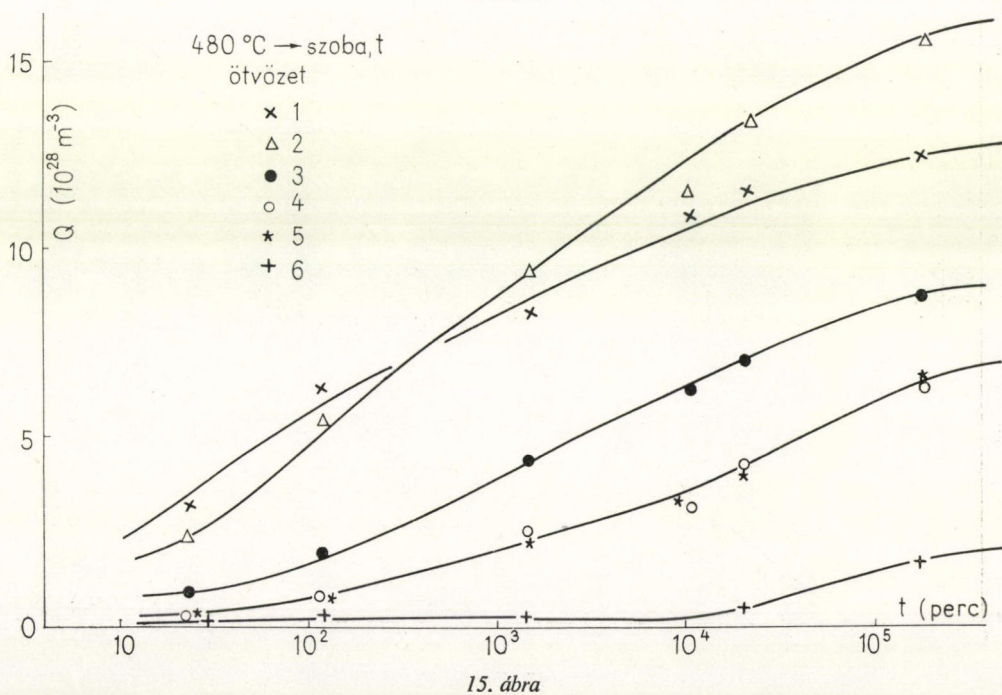
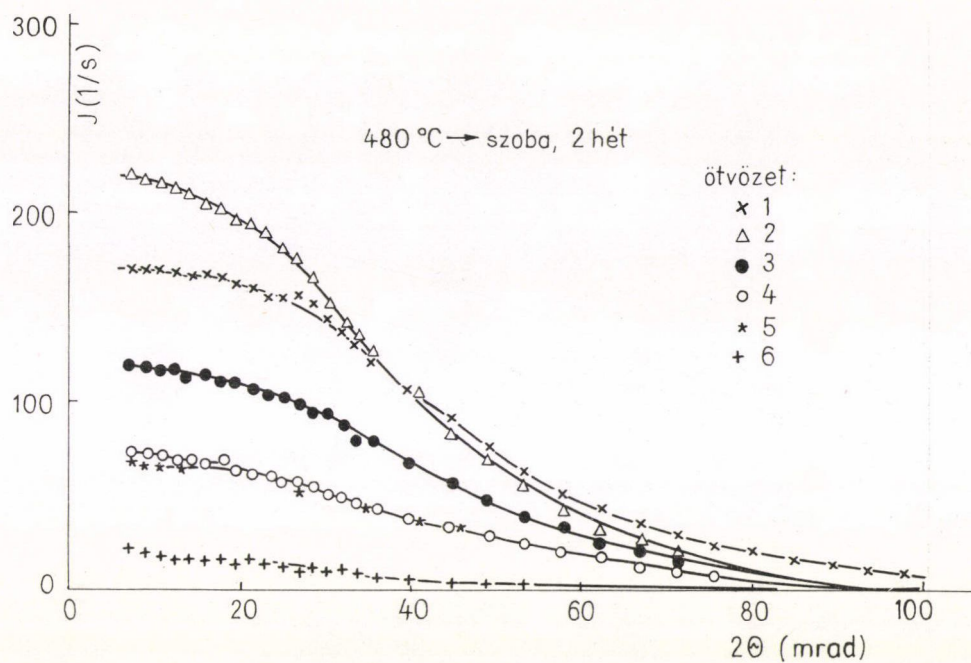
Az 1—6 ötvözetek 2 hetes szobahőmérsékleti hevertetéséhez tartozó intenzitás-eloszlás görbéket a 14. ábra mutatja. A szórt sugárzás intenzitása monoton nő a szilárd oldat túltelítettségének mértékével. (Meg kell jegyezni, hogy a 4. ötvözet az előbb vizsgált 9. minta adalékmentes változata).

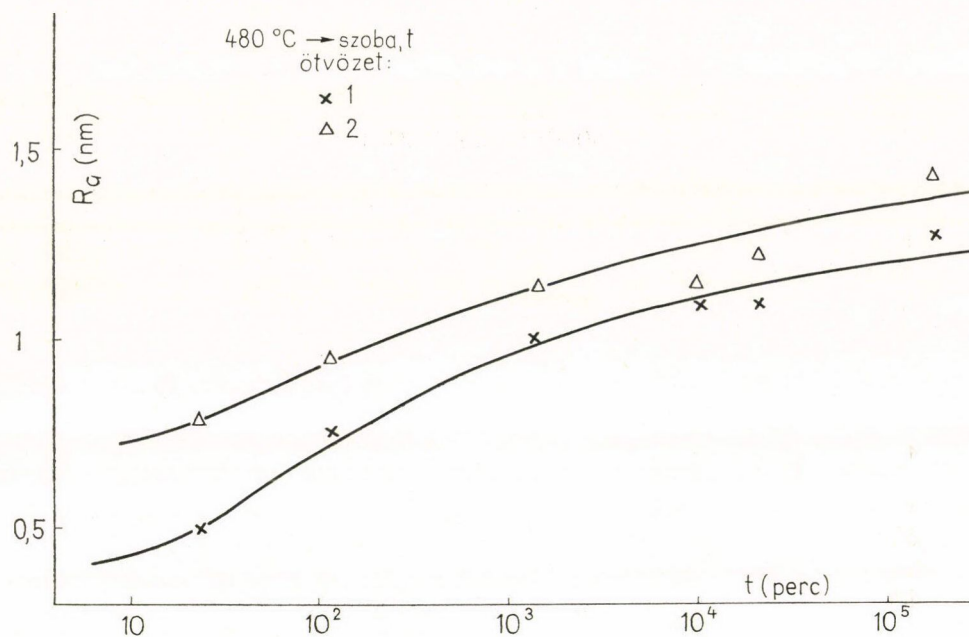


12. ábra

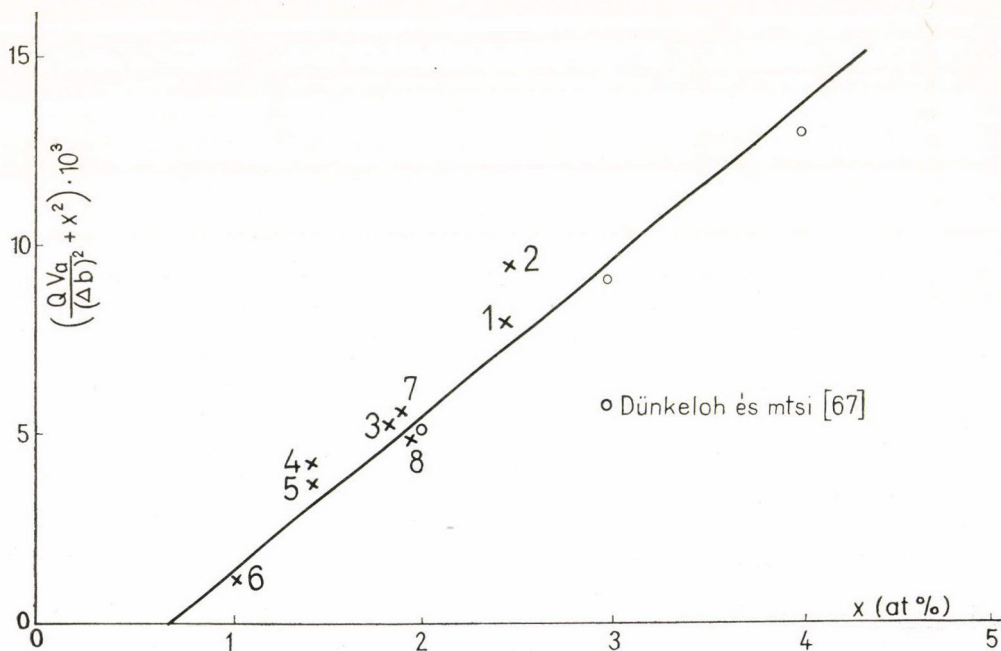


13. ábra





16. ábra



17. ábra

A 6. minta KRSZ-a hosszú hevertetés után sem növekedett jelentősen a háttér-intenzitás fölé. Ez összhangban áll azzal, hogy az ötvözet mechanikai és elektromos tulajdonságai sem változtak számottevően a hevertetés során. Az ötvözetben levő 1% Zn és 0,6% Mg a szobahőmérsékleti oldhatóság határához közel álló értékek.

Az 1—6. mintákról szórt sugárzás integrális intenzitásának változását a hevertetés során a 15. ábra mutatja. Valemennyi ötvözet esetében Q monoton növekedése figyelhető meg a hevertetési idővel, ugyanakkor néhány hónapos hevertetés után Q értéke telítésbe megy. Ezt tekintjük a szobahőmérsékleti metastabil egyensúlyi állapot eléréséhez szükséges időtartamnak.

Az 1. és 2. ötvözetekben keletkező zónák Guinier sugarának növekedése a hevertetéssel a 16. ábrán látható. A 4—6. minták megfelelő R_G értékei hasonló módon változnak.

4.2. A szobahőmérsékleti zónák összetételének meghatározása [114]

Módszert dolgoztunk ki és részletes vizsgálatokat végeztünk a szobahőmérsékleti zónák összetételének meghatározására [114].

Mint ezt a 2.3.6. pontban említettük, kétalkotós ötvözet esetében a (28) egyenlet bal oldalán szereplő, ún. redukált integrális intenzitást egy alkalmas ötvözetsorozat egyes tagjainak összetétele függvényében ábrázolva egyenest kell kapnunk. Az egyenes meredekségéből és tengelymetszetéből x_1 és x_2 meghatározhatók.

Ugyanezt a módszert *Düneloh, Kralik és Gerold* [67, 110] a háromalkotós Al—Zn—Mg rendszerben keletkező zónák Zn tartalmának meghatározására általánosították. Ehhez olyan ötvözetsorozatot kell találni, amely egy bizonyos hőmérsékleten adott szerkezetű és összetételű kiválásokra és azonos típusú szilárd oldatra esik szét. Ez azt jelenti, hogy az ötvözetsorozatnak azonos konóda mentén kell elhelyezkednie a háromalkotós rendszerben [129]. Az Al—Zn—Mg rendszerben ez különösen alkalmas módszer a GP zónák Zn tartalmának meghatározására, ugyanis a Mg és az Al szóróképessége mérési hibán belül megegyezik (röntgensugarak esetén), így az azonos konóda mentén fekvő ötvözetsorozatra a (28) egyenlet egyszerűen felírható, ha x , x_1 és x_2 a megfelelő Zn koncentrációkat jelentik.

Az 1—9. ötvözetekben hosszú idejű (2 hónapos) szobahőmérsékleti hevertetés során keletkező GP zónáknak megfelelő integrális intenzitásértékekből a (28) egyenlet alapján kiszámítottuk a redukált integrális intenzitást. Ennek értékeit a Zn koncentráció (x) függvényében a 17. ábrán tüntettük fel.

Düneloh és munkatársai [47] hasonló összetételű Al—Zn—Mg ötvözeteken vizsgálták a szobahőmérsékleti zónaképződést. Az általuk mért redukált integrális intenzitást üres körökkel jelöltük, amelyek jó közelítéssel a saját mérési pontjainkkal együtt egy egyenes mentén fekszenek.

A mérési pontokhoz a legkisebb négyzetek módszerével egyenest illesztve a zónán belüli x_1 és a megmaradó szilárd oldat x_2 cink koncentrációjára a következő értékek adódtak:

$$\begin{aligned} x_1 &= 42,2 \text{ at\%} \\ x_2 &= 0,74 \text{ at\%}. \end{aligned} \tag{32}$$

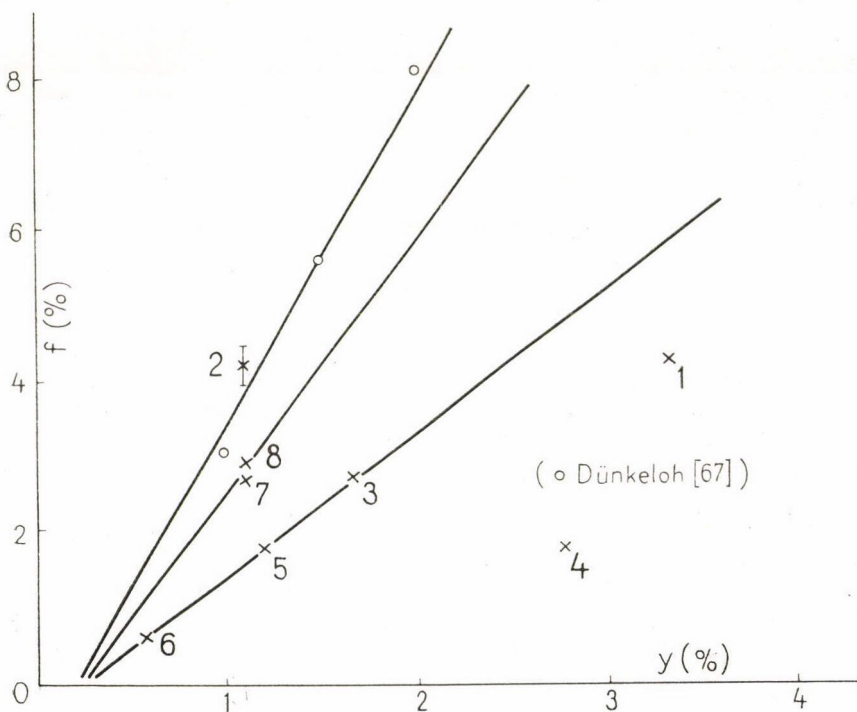
A hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés során kialakuló zónák térfogati hányada a fenti koncentrációértékek segítségével a (29) kifejezés alapján meghatározható a vizsgált ötvözetekben.

A zónák Mg koncentrációja a következő megfontolással határozható meg. Nyilvánvaló, hogy ha a Mg koncentrációt is mérni tudnánk, akkor az egyensúlyi zónák térfogati hányada a (29)-hez hasonló módon felírható lenne a zónán belüli y_1 és a megmaradó szilárd oldat y_2 Mg koncentrációjával is:

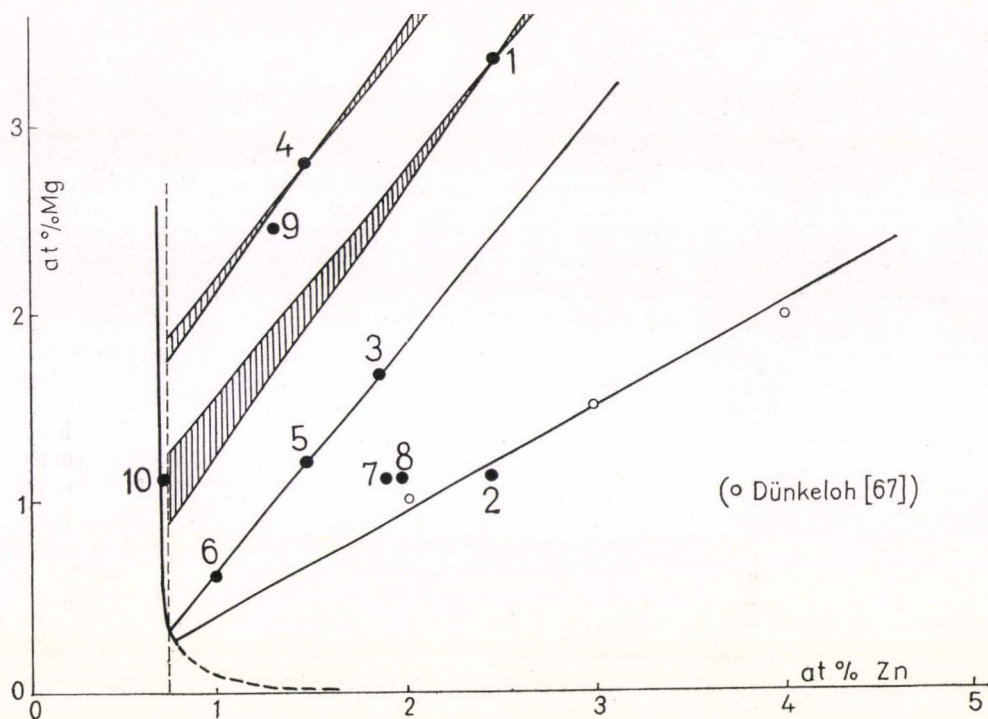
$$f = \frac{y - y_2}{y_1 - y_2}, \quad (33)$$

ahol y az ötvözet átlagos Mg koncentrációja. Az y_1 , y_2 értékek meghatározásához felhasználjuk azt a tényt, hogy az azonos konóda mentén fekvő ötvözetekben a zónák térfogati hányada y -nak lineáris függvénye. Ezek az ötvözetek ugyanis ugyanolyan összetételű zónákra, illetve megmaradó szilárd oldatra esnek szét. A zónák térfogati hányadát az ötvözetek Mg koncentrációjának függvényében a 18. ábrán tüntettük fel. Annak eldöntéséhez, hogy mely ötvözetek fekszenek azonos konóda mentén, meg kell vizsgálni azok elhelyezkedését a háromalkotós fázisdiagramon. A háromalkotós fázisdiagram Al sarka, a vizsgált ötvözetekkel a 19. ábrán látható.

A 18. és 19. ábrák összevetése alapján megállapítottuk, hogy egyrészt a 3, 5 és 6, másrészt a 2. és a Dünkeloh [67] által vizsgált ötvözetek egy-egy konóda mentén



18. ábra



19. ábra

helyezkednek el. A (33) egyenlet alapján erre a két ötvözetsorozatra meghatározhatjuk az y_1 és y_2 Mg koncentrációkat, melyekre a következő értékek adódtak:

$$\begin{aligned} y_1 \text{ (3, 5, 6 ötvözetekben)} &= 50 \text{ at\%,} \\ y_1 \text{ (2, Dünkeloh [67])} &= 20 \text{ at\%,} \\ y_2 &\cong 0,27 \text{ at\% (mindkét esetben).} \end{aligned} \quad (34)$$

Az 1, 4, 7 és 8 ötvözetekben kialakuló GP zónák Mg koncentrációját a konódák meredekségére vonatkozó termodinamikai megfontolások alapján becsülhetjük meg [130]. A 19. ábrán látható, hogy a 3, 5, 6 ötvözeteken átmenő konóda meredeksége erőteljesen megnő a 2 és Dünkeloh [67] által vizsgált ötvözetek konódájához képest. Figyelembe véve, hogy a konódák nem metszhetik egymást a kétfázisú tartomány határain belül, az 1. és 4. ötvözetekhez tartozó konódákra az ábrán feltüntetett határokat lehet megadni. A 7. és 8. ötvözetekhez tartozó konóda közel egy pontban fut össze a 3, 5, 6, illetve 2-höz tartozó konódákkal és kissé meredekebb a 2. ötvözethez tartozó konódánál. Az ábrán feltüntetett 10. ötvözet 0,72 at% Zn-et és 1,11 at% Mg-ot tartalmaz és a fázisdiagrammal összhangban szilárd oldat állapotban marad a szoba-hőmérsékleti hevertetés során.

Az 1. és 4. ötvözetekhez tartozó konódák termodinamikailag lehetséges M meredekségéből, valamint figyelembe véve, hogy a zónákon belüli ötvöző koncentráció

legfeljebb 100 % lehet, meghatározható az 1. és 4. ötvözetekben a zónán belüli lehetséges Mg koncentráció. A 4. ötvözetre ezek a feltételek a következő módon írhatók:

$$\begin{aligned} M_4 &\cong M_i = 1,20 \quad (i = 3, 5, 6) \\ y_1 &\cong 57,8 \text{ at}\%, \end{aligned} \quad (35)$$

ahol M_i az i -edik ötvözet konódájának a meredeksége. A fenti egyenlőtlenségekből a lehetséges koncentrációkra a következő határok adódnak:

$$\begin{aligned} 1,20 &\cong M_4 \cong 1,36 \\ 51,6 \text{ at}\% &\cong y_1 \cong 57,8 \text{ at}\% \\ 1,77 \text{ at}\% &\cong y_2 \cong 1,85 \text{ at}\%. \end{aligned} \quad (36)$$

Az 1. ötvözetre ugyanezek a megfontolások a következőt adják:

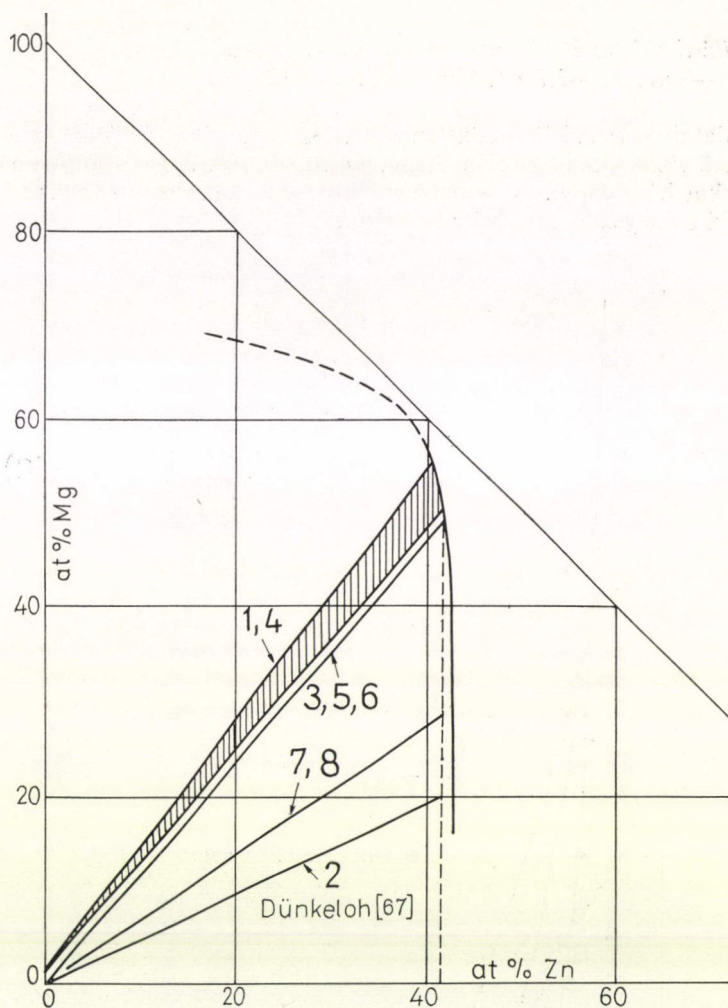
$$\begin{aligned} 1,20 &\cong M_1 \cong 1,36 \\ 51 \text{ at}\% &\cong y_1 \cong 57,3 \text{ at}\% \\ 0,91 \text{ at}\% &\cong y_2 \cong 1,25 \text{ at}\%. \end{aligned} \quad (37)$$

A GP zónák összetételét meghatározó fázishatárt, az egyes ötvözetcsoportokhoz tartozó konódákkal együtt a háromalkotós fázisdiagram szobahőmérsékleti metszében a 20. ábrán tüntettük fel.

A vizsgált ötvözetekben szobahőmérsékleten kialakuló zónák és a megmaradó szilárd oldat Mg koncentrációját a 2. táblázatban foglaltuk össze (x és y az ötvözetek átlagos Zn és Mg tartalma).

2. TÁBLÁZAT

Minta jele	x at %	y at %	y_1 at %	y_2 at %
1	2,48	3,33	51—57,3	0,91—1,25
2	2,48	1,11	20,5	0,27
3	1,86	1,67	50,0	0,27
4	1,48	2,78	51,6—58	1,77—1,85
5	1,48	1,21	50,0	0,27
6	1,01	0,61	50,0	0,27
7	1,90	1,11	29,2	0,27
8	1,95	1,11	29,9	0,27
9	1,33	2,42	51,5—58	1,65—1,72



20. ábra

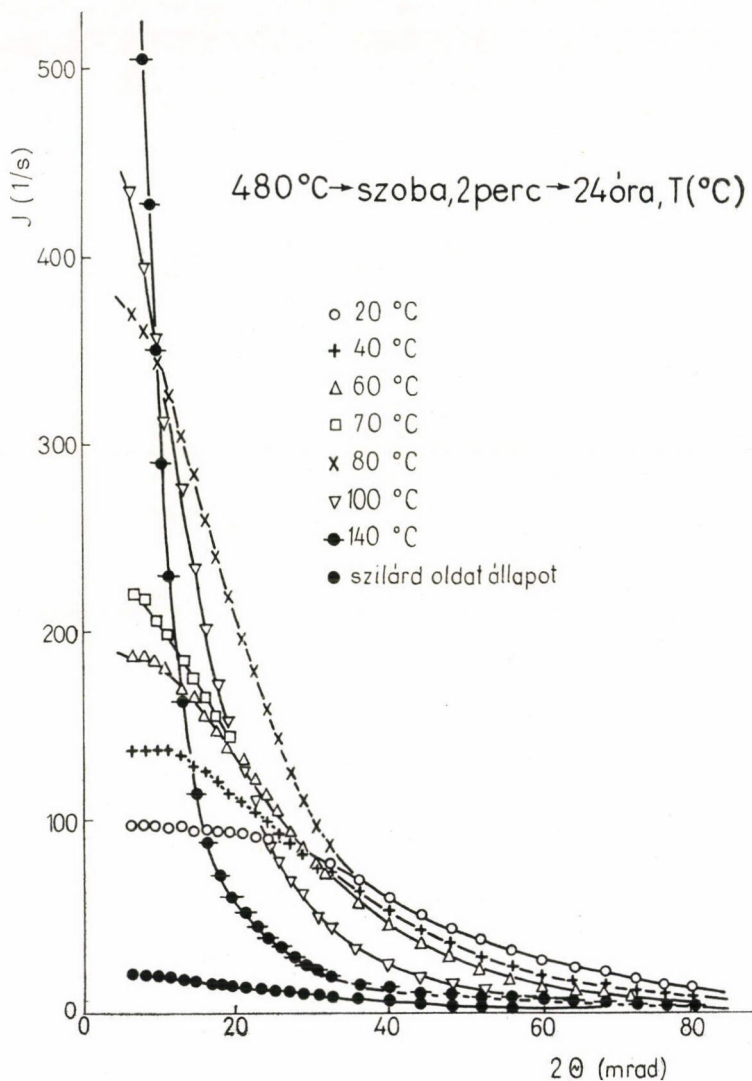
A zónák Zn koncentrációjára vonatkozó eredményeink jó egyezésben vannak *Dünkeloh, Kralik és Gerold* [47] hasonló ötvözeteken végzett vizsgálatainak eredményeivel. A zónák Mg tartalmára vonatkozó, neutron kisszögű szórásból származó eredményeket *Gerold, Epperson és Kostorz* [112], technikai nehézségek miatt csak mintegy kettes faktorbeli bizonytalansággal tudták megbecsülni. Így ezeket az eredményeket nem lehet érdemben összevetni az általunk jelentősen kisebb hibával megadott zónán belüli, illetve szilárd oldatban maradó Mg koncentráció értékkel.

4.3. Zónaképződés szobahőmérsékletnél magasabb hőmérsékleteken

A szilárd oldat szétesésének folyamatát részletesen tanulmányoztuk szobahőmérsékletnél magasabb hőmérsékleteken a 8. és 9. ötvözetekben.

4.3.1. A szilárd oldat szétesése szobahőmérséklet és 140°C között az Al—2 at%Zn—1,1 at%Mg ötvözetben [126]

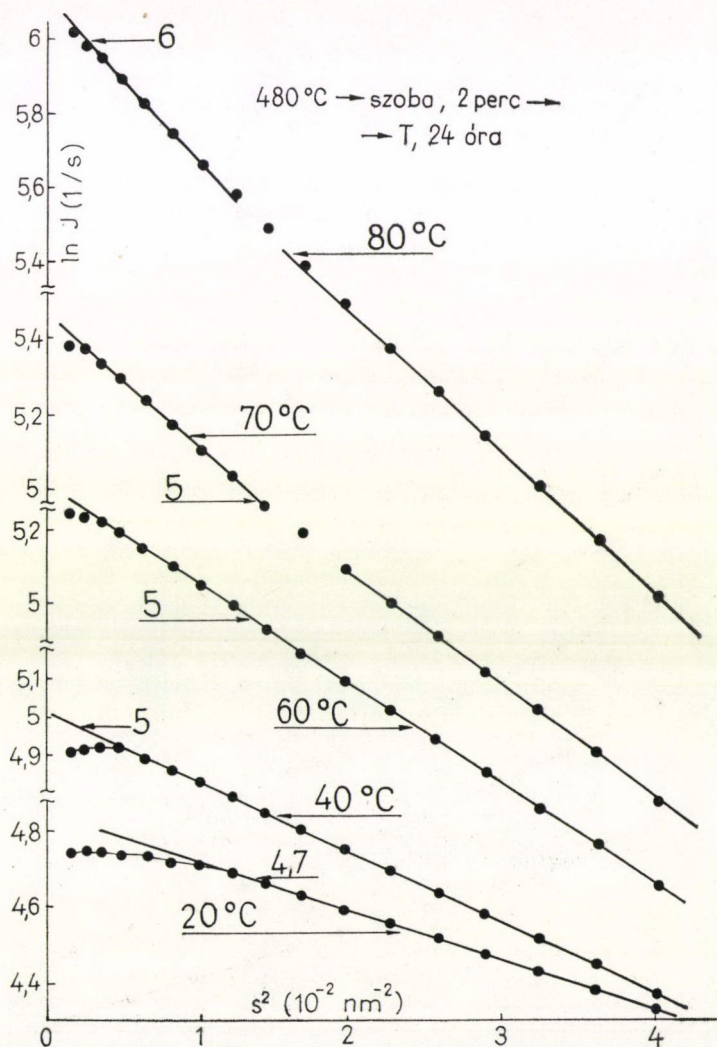
Vizsgálatainkat a 8. jelű ötvözetben végeztük. A mintákat oldó hőkezelés és szobahőmérsékletű vízbe történő edzés után 40, 60, 70, 80, 100, 120 és 140°C -on különböző időtartamokig hőkezeltük. A mintákat a hőkezelés után elektropolírozással tisztítottuk, majd behelyeztük a Kratky kamrába.



21. ábra

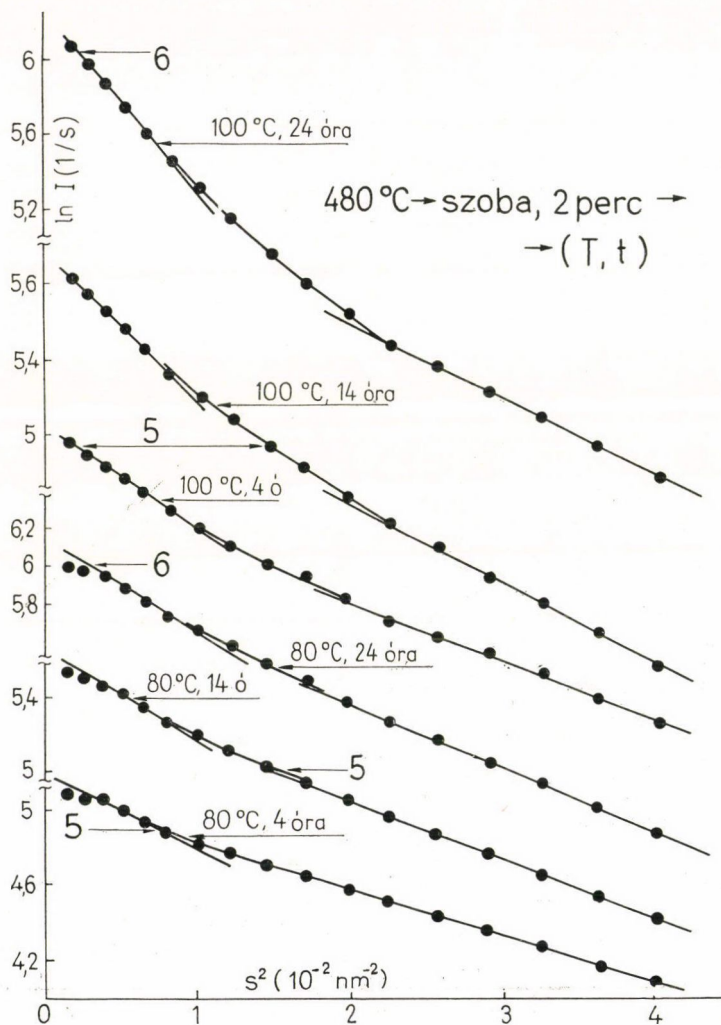
A különböző hőmérsékleteken 24 órát hőkezelt minták intenzitáseloszlás görbéi a 21. ábrán láthatók. Referenciaként megadtuk az oldó hőkezelés után közvetlenül mért intenzitáseloszlás görbét is. A szórt sugárzás intenzitásának monoton növekedése a hőmérséklettel, a kb. 30 mradnál kisebb szögeknél és monoton csökkenése az ennél nagyobb szögeknél azt mutatja, hogy a keletkező részecskék átlagos mérete monoton nő a hőmérséklettel.

A 20 és 80 °C között 24 órát hőkezelt minták intenzitáseloszlásának Guinier ábrázolását a 22. ábrán tüntettük fel.



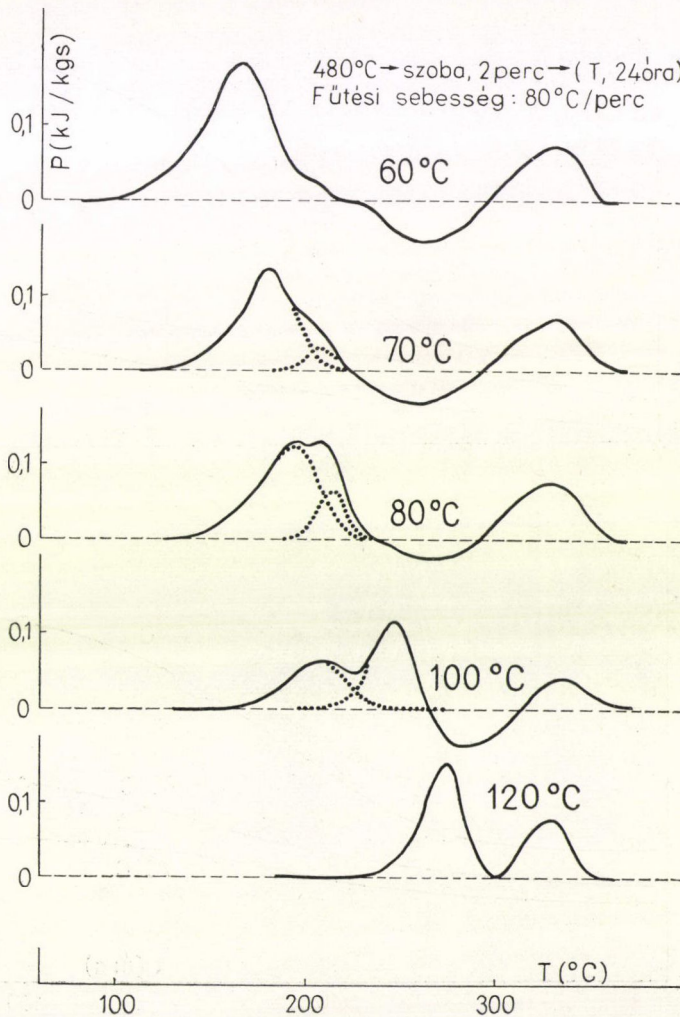
22. ábra

Látható, hogy kb. 60 °C-ig egyetlen jól definiált Guinier egyenes illeszthető a mérési pontokhoz. Az egészen kis szögek tartományában a mért pontok a Guinier egyenes alatt maradnak a részecskék közötti interferenciának megfelelően [106]. 60 °C fölött azonban két, viszonylag jól meghatározott egyenes illeszthető a mérési pontokhoz. Ez azt jelenti, hogy ezeken a hőmérsékleteken az ötvözetben két eltérő átlagméretű részecske képződik. A kétféle részecske jelenléte 70, 80 és 100 °C-on a hőkezelés egész időtartama alatt megfigyelhető, amint ez a 23. ábrából kitűnik. A kétféle részecske tehát a hőkezelés kezdeti szakaszán egyszerre képződik és a későbbiek folyamán a vizsgált időtartamon belül végig megtalálható az ötvözetben.



23. ábra

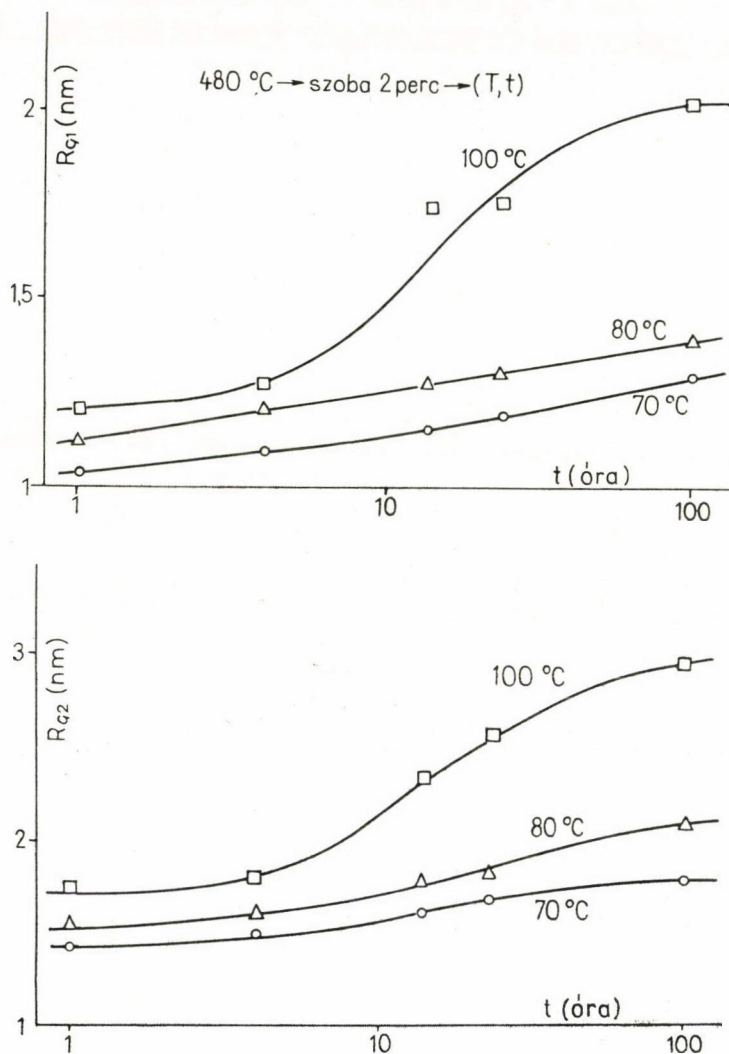
Ugyanezen az ötvözetben végzett kaloriméteres vizsgálatok egyértelműen alátámasztják azt, hogy a 70 és 100 °C-os hőmérséklettartományban kétféle részecske keletkezik az ötvözetben [131]. Oldóhőkezelés után különböző hőmérsékleteken 24 órát hőkezelt minták DSC—2 kaloriméterben 80 °C/perces felfűtés közben nyert termogramjai (24. ábra) jól mutatják, hogy az első endoterm csúcsok 70, 80 és 100 °C-on két endoterm reakcióból tevődnek össze. Az ábrán szaggatott vonallal jelöltük a felbontott csúcsokat. A 60 °C-os hőkezelés után kapott termogram első endoterm csúcsa is mutat egy egészen kis vállat a magas hőmérsékletű oldalán. Az ennek megfelelő reakcióhő azonban jelentéktelen az egész reakciónak megfelelő reakcióhőhöz képest. Valamennyi termogramon megfigyelhető az η' átmeneti fázis beoldódásának



24. ábra

megfelelő 2. endoterm csúcs 320°C körül. A 120°C -os hőkezeléshez tartozó termogramban a 2. endoterm csúcs is az η' fázis beoldódásából származik [62, 83]. Az alacsonyabb hőmérsékleteken jelentkező endoterm csúcs viszont egyetlen reakciót jelez. A kétféle részecske kialakulása tehát 120°C -on 24 óra után már nem figyelhető meg.

A 70 , 80 és 100°C -os hőkezelésekhez tartozó Guinier ábrázolások alapján meghatároztuk a kétféle részecske Guinier sugarát. A kisebb átlagméretű részecskék Guinier sugarát a továbbiakban jelöljük R_{G1} -gyel, a nagyobbakét R_{G2} -vel. R_{G1} és R_{G2} értékeit a 25. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy mindkét részecsketípus átlagmérete monoton növekszik a hőkezelés időtartamával. Ugyanakkor 100°C -on jelen-



25. ábra

tős méretnövekedés tapasztalható kb. 10 órás hőkezelési időtartam körül, mindkét részecsketípusban.

Számos bizonyíték van arra, hogy 100°C -nál alacsonyabb hőmérsékleteken a szilárd oldat szétesése zónaképződéssel megy végbe az itt vizsgált ötvözetípusban [3, 16, 41, 42, 60, 67, 114, 127]. Ugyanakkor 120°C fölött (mintegy 180°C -ig) az η' átmeneti fázis kialakulása a döntő folyamat [16, 60, 67, 70, 73, 75].

Mind a KRSZ, mind a kaloriméteres mérések azt mutatják, hogy 60 és 100°C között a szilárd oldat szétesése két különböző típusú GP zóna kialakulásával megy végbe. A KRSZ vizsgálatok szerint a kétféle zóna az átlagméretében különbözik. A kaloriméteres mérések alapján a termodinamikai stabilitásuk különböző. Elektron-diffrakciós vizsgálatok, amelyekre még visszatérünk, azt mutatják, hogy a zónáknak nincs önálló, az alpmátrixtól eltérő kristályszerkezetük, és természetesen koherensen illeszkednek a mátrixhoz.

A kisebb átlagméretű zónák, melyeket a továbbiakban GPI-nek nevezünk, minden bizonnyal a 60°C -nál alacsonyabb és különösen szobahőmérsékleten keletkező GP zónákkal azonos típusúak. A nagyobb átlagméretű zónák (ezeket GPII-nek fogjuk nevezni), nagyon valószínűen az η' átmeneti fázis magjainak valamiféle előzményei.

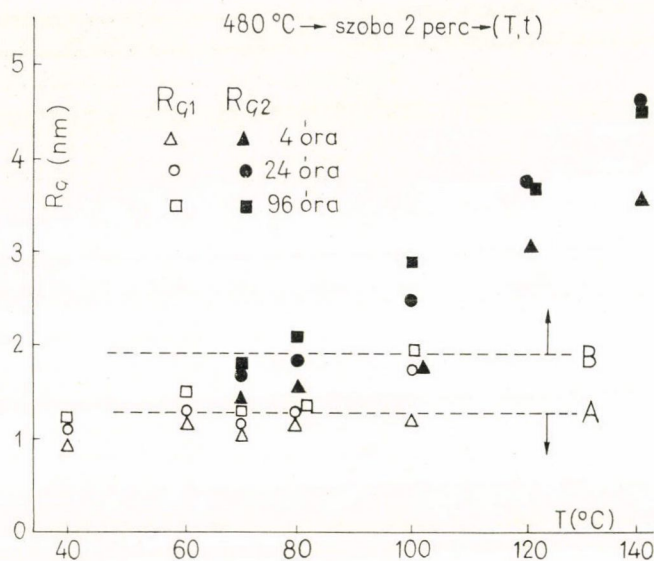
Mint említettük, a 100°C -os hőkezelés során mind R_{G1} , mind R_{G2} erőteljesen növekszik a 10 órás hőkezelési időtartam körül (25. ábra). Ez arra utal, hogy 100°C -on a hőkezelés kezdetén kialakul a GPI és GPII típusú, kétféle zóna, a későbbiekben azonban a GPI típusú részecskék megszűnnek, illetve átnőnek GPII típusúvá, ugyanakkor a nagyobb, GPII típusú részecskék átnőnek az η' átmeneti fázis részecskéibe. Ugyanezt támasztják alá a kaloriméteres vizsgálatok. A 24. ábrán látható, hogy a 100°C -os termogram első endoterm reakciójában a két csúcs hőmérséklete jelentősen magasabb a 80°C -os termogram megfelelő hőmérsékletértékeihez képest.

A különböző hőmérsékleteken különböző időtartamú hőkezelések után meghatározott R_{G1} és R_{G2} Guinier sugárértékeket a 26. ábrán tüntettük fel. Feltételezve, hogy 40°C -on nagyon hosszú (100 óra) idő alatt sem keletkezik GPII zóna, továbbá, hogy 80°C -on csak nagyon hosszú (100 óra) hőkezelések után keletkezhetnek η' típusú részecskék, a részecskék átlagmérete 3 különböző tartományba sorolható az ábrának megfelelő módon. Az első tartományban (A -val jelölt szaggatott vonal alatt) $R_G \lesssim 1,3 \text{ nm}$ és a részecskék GPI zónák. A második tartományban (A és B között) $1,3 \text{ nm} \lesssim R_G \lesssim 1,9 \text{ nm}$, a részecskék GPII zónák. Végül, ha $R_G \gtrsim 1,9 \text{ nm}$ (B fölött), a részecskék az η' átmeneti fázis magjai, illetve részecskéi.

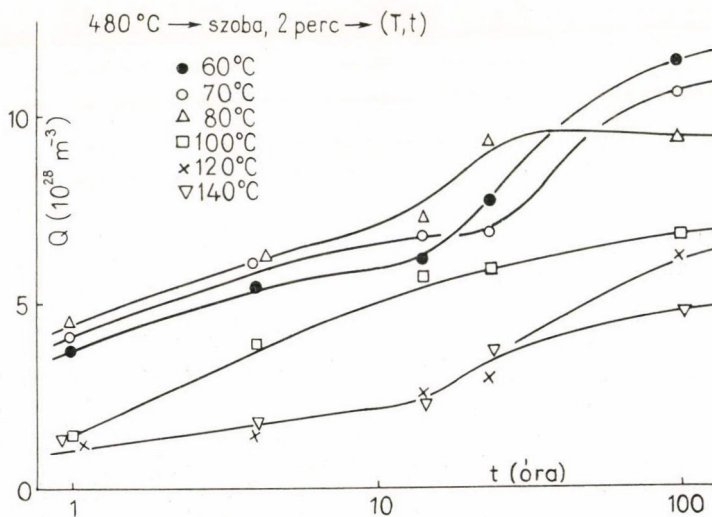
Mindezek alapján úgy tűnik, hogy az átlagos részecskeméret alkalmas paraméter a keletkező részecskék típusának meghatározására. Ez természetesen nem azt jelenti, hogy a részecskék más fizikai tulajdonságokban, mint pl. a szerkezet, alak, a mátrixszal való koherencia és az összetétel, nem különböznek egymástól. Ezeket a tulajdonságokat azonban a jelen esetben szinte lehetetlen vizsgálni elsősorban a részecskék nagyon kis térfogati hányada miatt.

Az integrális intenzitást a hőmérséklet és az idő függvényében a 27. ábra mutatja. 60, 70 és 80°C -on Q értéke a hőkezelés során mindvégig nagyobb a magasabb hőmérsékletű hőkezelések során kapott értékekhez képest. 120 és 140°C -on Q növekedése viszonylag hosszú inkubációs periódus után indul meg jelentősebben. 100°C -on Q alacsony értékről indul, viszont a növekedés mértéke a hőkezelés elején is jelentős. A zónaképződésnek, közismert módon, nincs jelentős inkubációs periódusa, ennek megfelelően 60, 70 és 80°C -on már 1 óra alatt Q értéke viszonylag magas értéket ér el.

Az η' átmeneti fázis kialakulása viszont inkubációval induló folyamat [60], amit jól mutatnak a 120 és 140 °C-os görbék. Q -nak a 100 °C-on megfigyelhető viselkedése átmenetet képez az alacsonyabb, illetve magasabb hőmérsékleten megfigyelhető viselkedéshez képest. Itt Q növekedése 1 órás, vagy annál rövidebb idejű inkubációval indul, ugyanakkor a növekedés mértéke sokkal erőteljesebb, mint 120 és 140 °C-on.



26. ábra

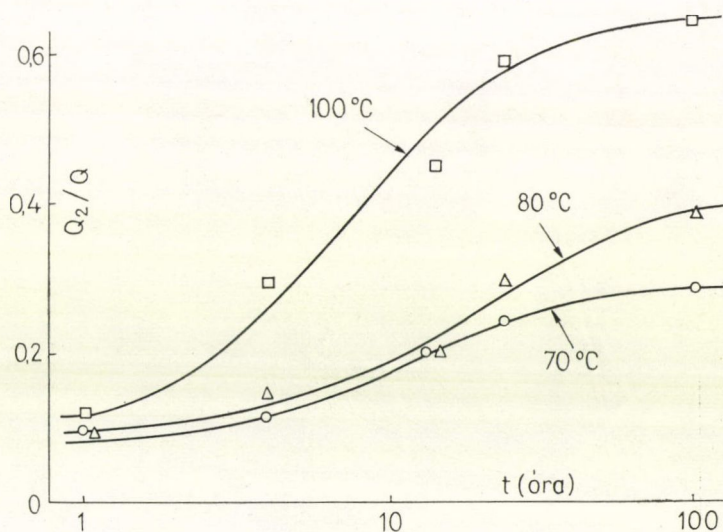


27. ábra

Ez összhangban van azzal, hogy 100 °C-on a szilárd oldat szétesése még zónaképződéssel indul, de a folyamat során (10 óránál hosszabb idő után) kialakulnak az η' átmeneti fázis magjai, illetve részecskéi.

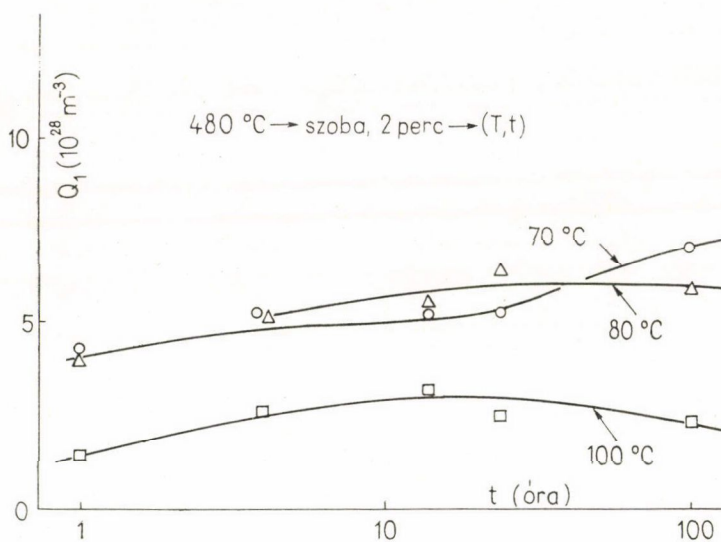
A 60, 70 és 80 °C-on meghatározott kétféle Guinier sugár alapján meghatározható a különböző típusú részecskékhez tartozó integrális intenzitás a következő módon. A nagyobb Guinier sugárnak megfelelő, kisebb szögek tartományában a szórt sugárzás a nagyobb átlagméretű részecskék szórásának megfelelően változik. Hasonlóan, a kisebb Guinier sugárnak megfelelő, nagyobb szögek tartományában a szórt sugárzás intenzitása a kisebb részecskéknek megfelelően változik, ugyanakkor ebben a szögtartományban a nagyobb részecskék szórása már gyakorlatilag zérus. Jelöljük a szórt sugárzásnak a Guinier egyenesekkel a zérus szöghöz extrapolált intenzitásértékeit $J_1(\sigma)$ -val és $J_2(\sigma)$ -val. Feltételezve, hogy a Guinier közelítés széles szögtartományban jól leírja az intenzitáseloszlást, a nagyobb átlagméretű részecskék Q_2 integrális intenzitása az egész integrális intenzitáshoz viszonyítva a következő módon adható meg:

$$\frac{Q_2}{Q} = \frac{R_{G1}^2 (J_2(\sigma) - J_1(\sigma))}{R_{G1}^2 (J_2(\sigma) - J_1(\sigma)) + R_{G2}^2 J_1(\sigma)}. \quad (38)$$

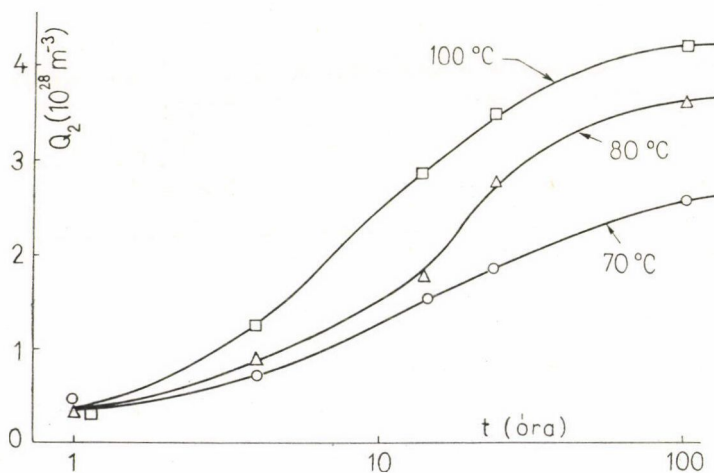


28. ábra

70, 80 és 100 °C-os különböző idejű hőkezelések után Q_2/Q értékeit a 28. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy 70 és 80 °C-on Q_2/Q hosszú idő után sem haladja meg a 40%-ot, míg 100 °C-on 24 óra után eléri, majd meghaladja a 60%-ot. A 29. és 30. ábrákon feltüntettük Q_1 és Q_2 értékeit a hőmérséklet és az idő függvényében. Q_1 a kisebb átlagméretű részecskéknek megfelelő integrális intenzitás. 70 °C-on Q_1 monoton növekszik, 80 °C-on kb. 24 óra után telítésbe megy, ugyanakkor 100 °C-on 14 óra körül enyhe maximumot mutat. Q_2 monoton növekszik valamennyi vizsgált hőmérsékleten és a növekedés mértéke a hőmérséklettel növekszik.



29. ábra



30. ábra

Az előzőek értelmében Q_1 és Q_2 változása azt mutatja, hogy 60 °C fölött a GPI és GPII zónák képződése folytonosan megy végbe a hőkezelés egész időtartama alatt. 80 °C-on a GPI zónák képződése telítésbe megy, mintegy 14 órás időtartam után, míg a GPII zónák kialakulása kissé erőteljesebbé válik a hosszabb időtartamoknál. 100 °C-on a 10 óránál hosszabb időtartamoknál valószínűleg, egyrészt a GPI → GPII, másrészt a GPII → η' szilárd fázisú reakciók mennek végbe. A 30. ábra tanúsága szerint Q_1 enyhe csökkenése (ami a zónák mennyiségének csökkenését jelzi), másrészt

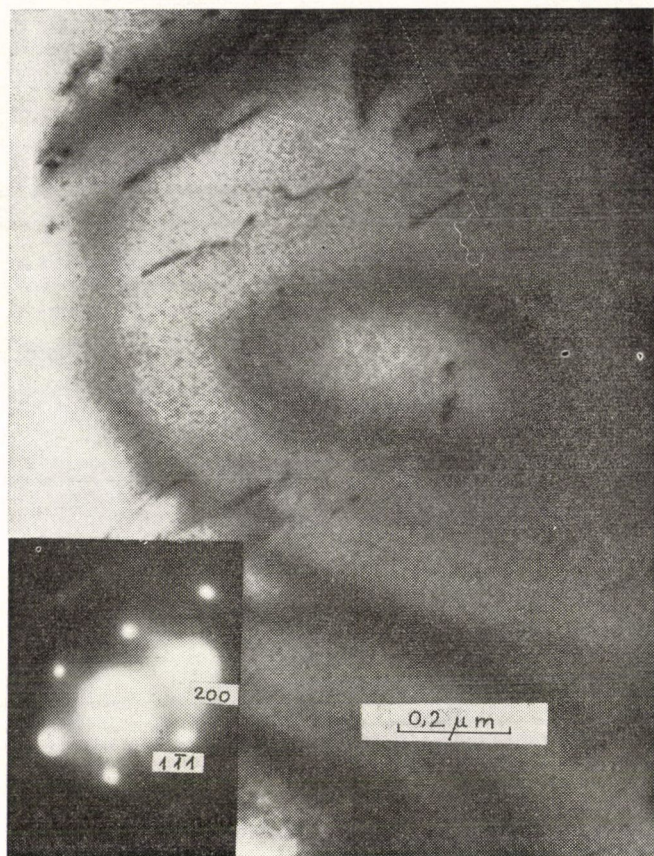
Q_2 erőteljes növekedése (ami itt az η' fázis kialakulásának felel meg) azt mutatja, hogy ezen a hőmérsékleten és ilyen időtartamoknál a $GPII \rightarrow \eta'$ reakció igen erőteljessé válik.

A 31—33. ábrák 80 és 100 °C-on 24 órát, valamint 120 °C-on 96 órát hőkezelt minták transzmissziós elektronmikroszkópi (TEM) képét és megfelelő diffrakciós felvételét mutatják. A 31. ábra homogén eloszlású, kis részecskéket mutat, amelyeknek átmérője nem nagyobb, mint 2-3 nm. A 100 °C-os hőkezelésnek megfelelő 32. ábra szintén egyenletesen eloszló kis részecskéket mutat, amelyeknek átlagmérete



31. ábra

nagyobb, mint a 80 °C-on megfigyelhetők, de jóval kisebb, mint 10 nm. A 33. ábra a 120 °C-on 96 órát hőkezelt minta TEM képét mutatja. A részecskék átmérője mintegy 10 nm, eloszlásuk meglehetősen egyenletes, bár lényegesen kisebb diszperzitású, mint 100 vagy 80 °C után. A diffrakciós képen jól megfigyelhetők a koherensen illeszkedő η' átmeneti fázis részecskéinek diffrakciós foltjai, egyezésben *Melander* és



32. ábra

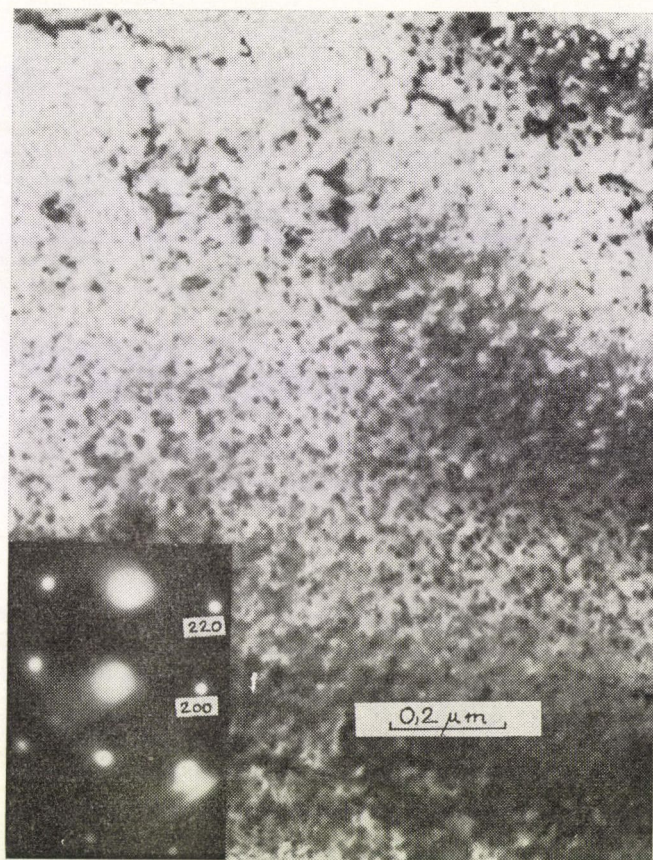
Persson megfigyeléseivel [75]. Az elektronmikroszkópos megfigyelések jól alátámasztják az előzőekben mondottakat.

Összefoglalva a következőket mondhatjuk. A vizsgált ötvözetben a szilárd oldat szétesése 60°C -ig, mintegy $1,3\text{ nm}$ -nél nem nagyobb Guinier sugarú ($\sim 3,5\text{ nm}$ valódi átmérőjű) GP zónák képződésével megy végbe. A zónák termodinamikai stabilitása viszonylag alacsony, reverziós hőmérsékletük $160\text{--}170^\circ\text{C}$ -nál alacsonyabb.

A 60 és 100°C -os hőmérséklettartományban két különböző típusú GP zóna képződése figyelhető meg. Ezek elsősorban átlagos méretükben és termikus stabilitásukban különböznek egymástól.

100°C -on a szilárd oldat szétesése a GPI és GPII zónák kialakulásával indul meg, hosszabb idők után azonban a GPI zónák eltűnnek (valószínűleg feloldódnak, illetve átalakulnak GPII típusúvá), ugyanakkor megjelennek az η' fázis részecskéi.

100°C -nál magasabb hőmérsékleteken az η' fázis részecskéinek nukleációja és növekedése a döntő folyamat.



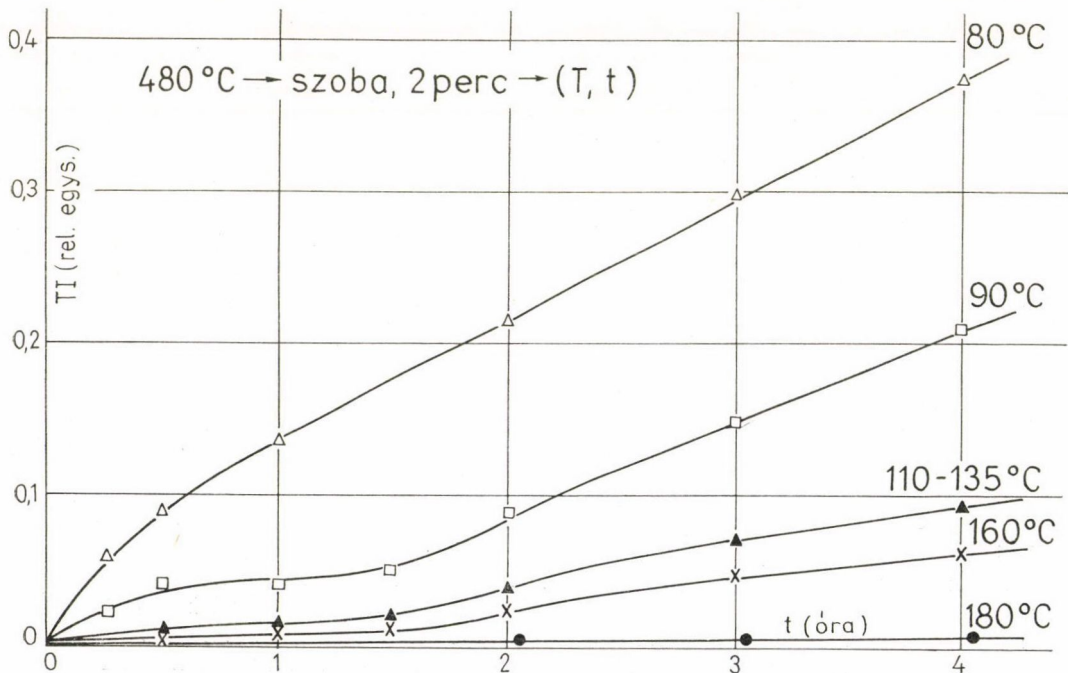
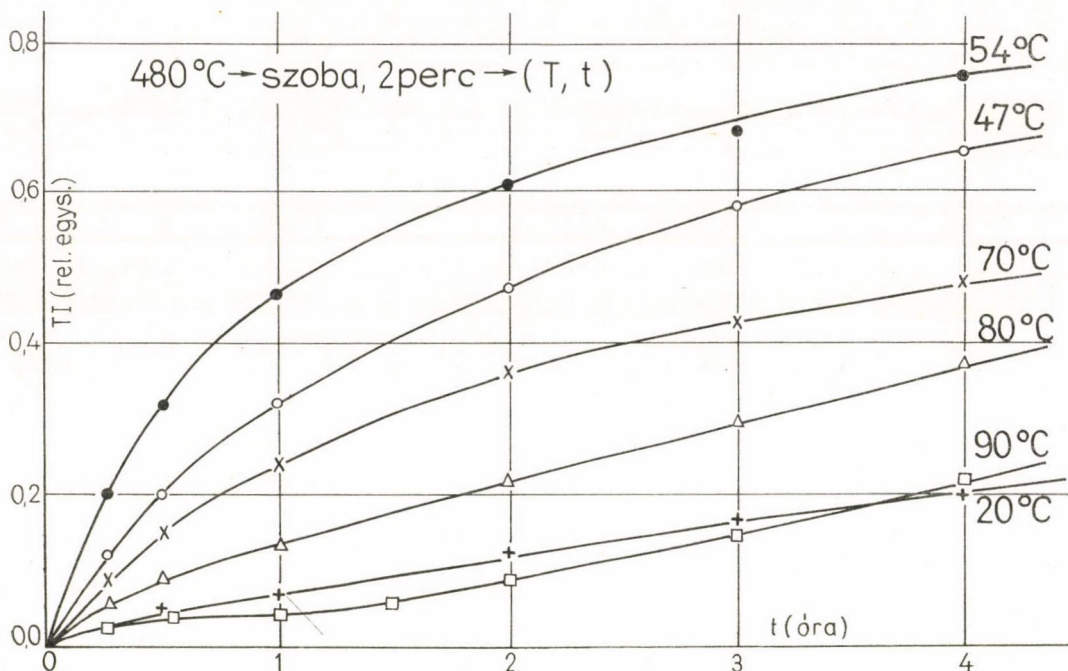
33. ábra

4.3.2. A szilárd oldat szétesése szobahőmérséklet és 200 °C között az Al—1,33 at%Zn—2,4 at%Mg ötvözetben [132]

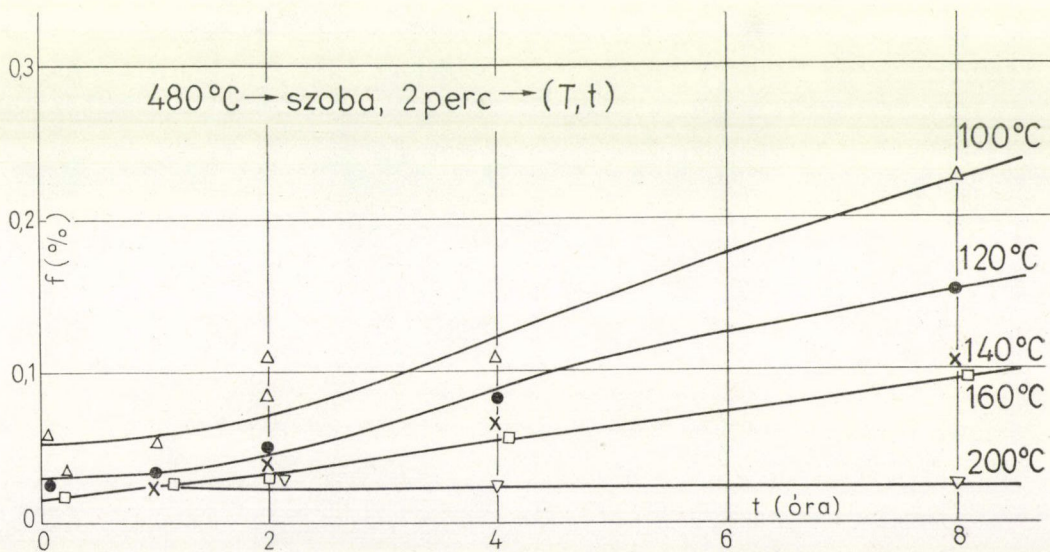
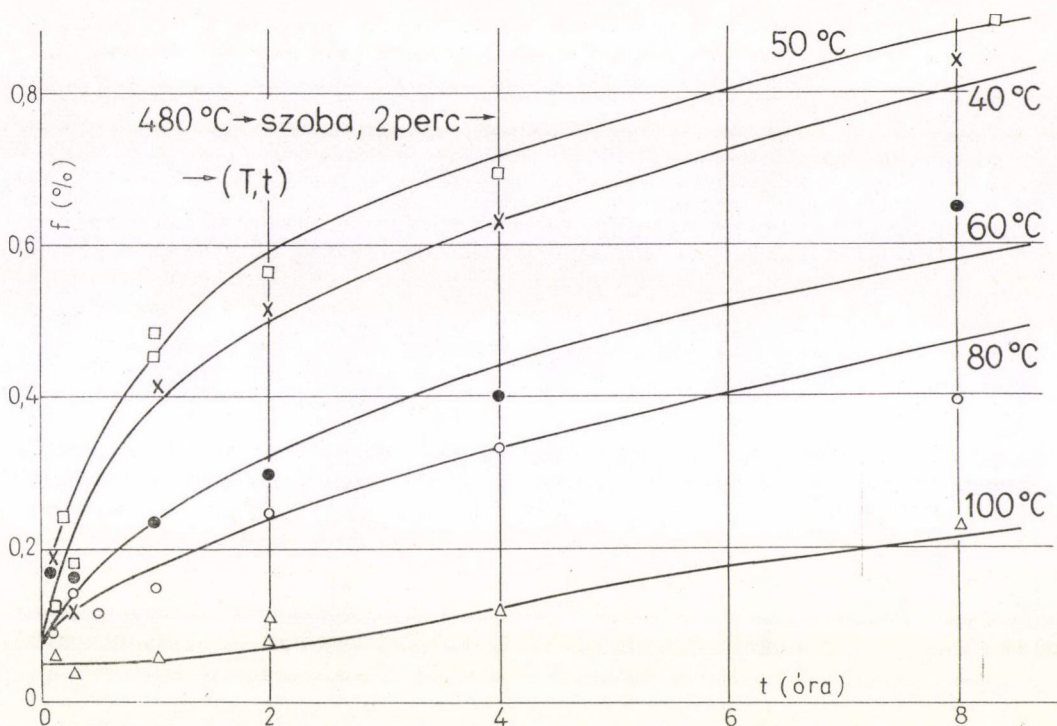
Részletesen vizsgáltuk a zónaképződést és az átmeneti fázis kialakulását szobahőmérséklet és 200 °C között a 9. ötvözetben. Ez az ötvözet, mint említettük, a Zn és Mg ötvözők mellett Fe, Si, Mn és Ti mikroötvözőket is tartalmaz és így egy technikai tisztaságú ötvözet modelljének tekinthető.

A mintákat 480 °C-on 30 percig oldó hőkezeltük, majd szobahőmérsékletű vízbe edzés után 1 percen belül a kívánt hőkezelési hőmérsékletre helyeztük.

Az ötvözet alacsony ötvözőtartalma miatt a szilárd oldat szétesés kezdeti szakaszán képződő részecskék térfogati hányada csupán néhány tized százalék, ami csak nagyon csekély többlet szórt sugárzást eredményez a háttér szóráshoz képest. Ezért célszerűnek látszott a szórt sugárzás növekedésének kinetikáját a különböző hőmérsékleteken „in situ” módon nyomon követni, az erre a célra átalakított, pontfókuszú



34. ábra

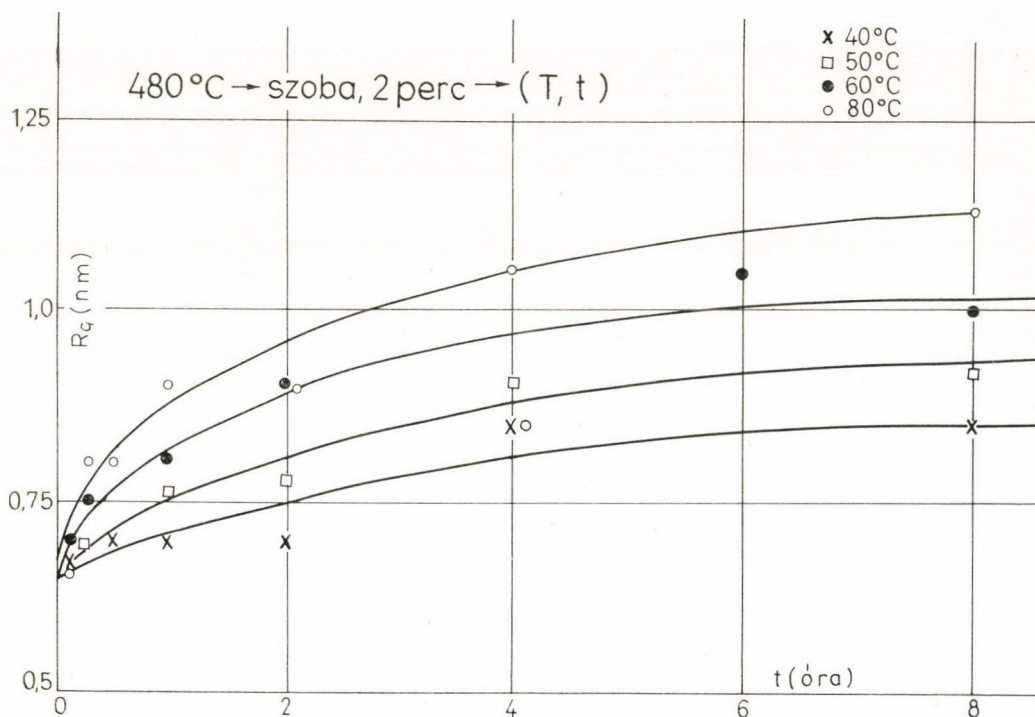


35. ábra

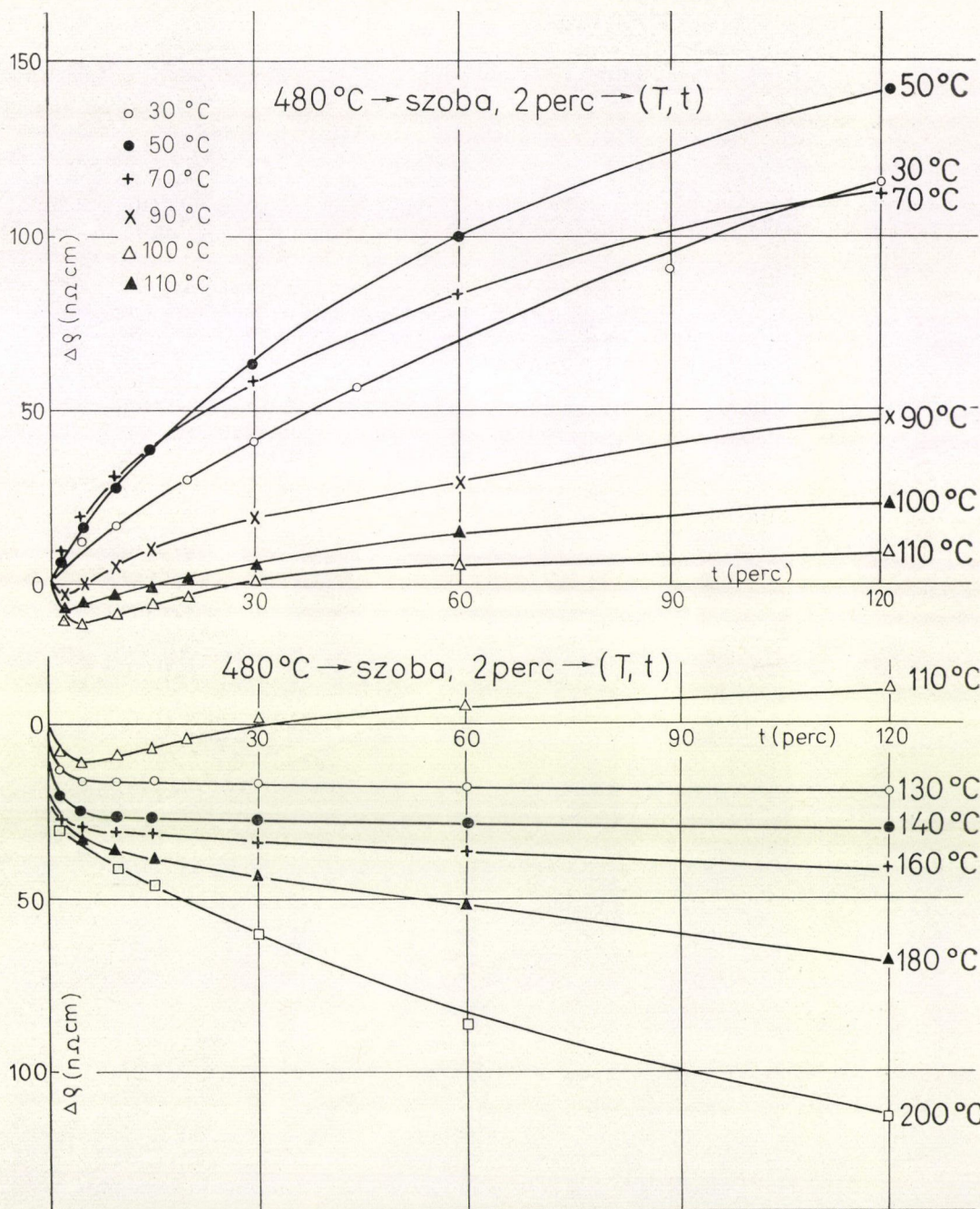
Kiessig típusú kamra segítségével. A 6—60 mrad szögtartományba szórt teljes intenzitás (TI) változását a hőkezelési idő és hőmérséklet függvényében a 34. ábrán tüntettük fel. 90 °C-nál alacsonyabb hőmérsékleteken TI monoton növekedése figyelhető meg. A növekedés mértéke 50 °C körül a legnagyobb. 90 °C-on és annál magasabb hőmérsékleteken TI növekedése kb. 60—90 perces inkubációs periódus után válik csak jelentőssé. 180 °C-on TI növekedés nem volt megfigyelhető, ami annak tulajdonítható, hogy az ezen a hőmérsékleten keletkező részecskék kritikus magmérete nagyobb, mint a kamra felbontóképessége és így már a nukleáció pillanatában sem észlelhetők a jelen berendezéssel. Figyelembe kell ugyanakkor venni, hogy 180 és 200 °C körül az ötvözet túltelítettsége erősen lecsökken. Így az itt keletkező részecskék valószínűleg nagy kritikus mérete mellett a térfogati hányaduk sem lehet jelentős, ami tovább nehezíti a kimutathatóságukat.

$T (^{\circ}\text{C})$	X_1^{Zn} (at %)
20	42
40	43
50	44
60	46
80	51
100	56

A 40 és 200 °C között különböző ideig hőkezelt minták KRSZ-át meghatároztuk a Kratky kamra segítségével is. Az integrális intenzitásból a (30) kifejezés alapján meghatároztuk a GP zónák, illetve magasabb hőmérsékleteken az átmeneti fázis részecskéinek térfogati hányadát, f -et. A részecskéken belüli Zn koncentrációt a 4.2. fejezet, valamint *Düinkeloh, Kralik és Gerold* [67] munkája alapján a táblázatban látható értékeknek vettük.



36. ábra



37. ábra

A 100 °C feletti méréseknél a részecskéket MgZn_2 összetételűnek tekintettük, ami megfelel az átmeneti fázis összetételének.

Az f térfogati hányad változása a hőmérséklet és az idő függvényében a 35. ábrán látható. A 34. ábrán feltüntetett TI változásával egyezésben f növekedése 50 °C-on maximális, 100 °C-nál magasabb hőmérsékleteken pedig mintegy 60–90 perces inkubációs periódust mutat.

A 4.3.1. fejezetben vizsgált 8. ötvözethez hasonlóan a 9. ötvözetben mért intenzitás-eloszlás görbék is két egyenes szakaszt mutatnak a Guinier-féle ábrázolásban a 60 és 90 °C közötti hőmérséklettartományban. A 36. ábra a Guinier sugár változását mutatja idő és hőmérséklet függvényében 40 és 80 °C között. A 60 és 80 °C-os értékek a kisebb, GPI zóna Guinier sugarának felelnek meg. Látható, hogy egy-egy hőmérsékleten a részecskeméret monoton nő és magasabb hőmérsékleten a növekedés mértéke nagyobb. Ugyanakkor a 26. ábrával összevetve kitűnik, hogy a kisebb részecskeméret 80 °C-on 8 óra után sem éri el a GPII zónáknak megfelelő értéket.

A 480 °C-on oldó hőkezelt, majd szobahőmérsékletű vízbe edzett és szobahőmérsékleten egy percet tartott minták fajlagos elektromos ellenállásának változását 30 és 200 °C közötti hőkezelések hatására a 37. ábrán láthatjuk. 30 és 70 °C között az edzett állapot ellenállásához viszonyítva monoton növekedés figyelhető meg. A mérések időtartama alatt a legnagyobb ellenállásnövekedést 50 °C-on észleltük jó egyezésben azzal, hogy a térfogati hányad növekedése is ezen a hőmérsékleten a legnagyobb, amint ez a 34. és 35. ábrákból kitűnik.

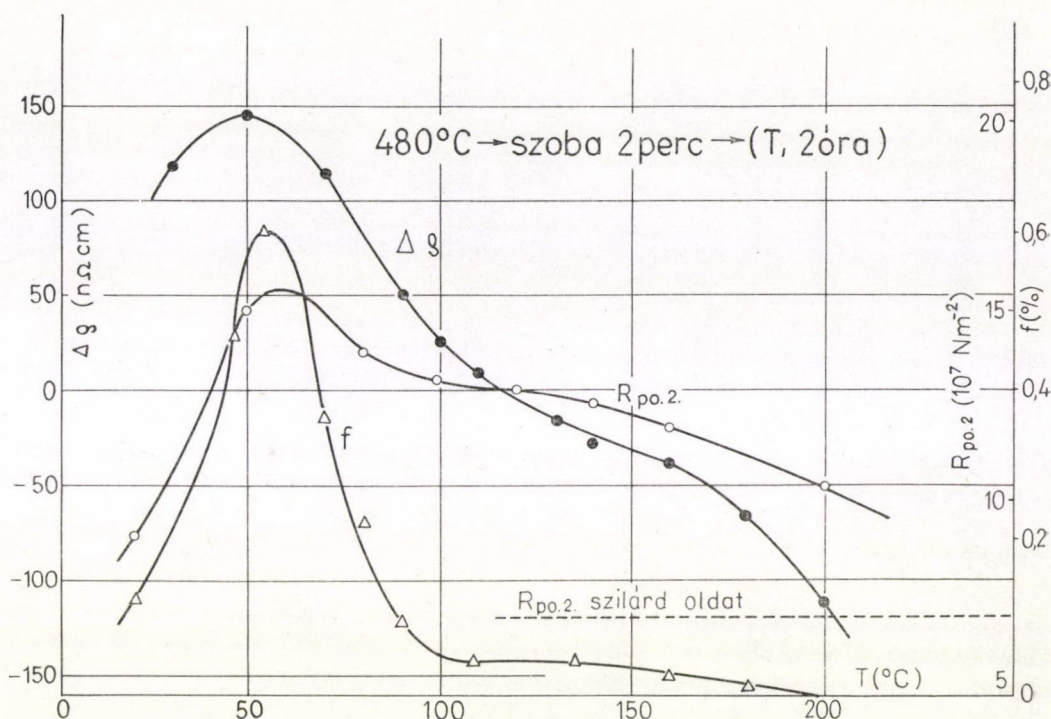
90, 100 és 110 °C-on az ötvözet ellenállása kezdetben rövid ideig csökken, majd egy minimum elérése után monoton növekszik. Az ellenállás növekedése ezeken a hőmérsékleteken, a KRSZ mérésekkel összhangban GP zónák kialakulására utal. A kezdeti minimumig megfigyelhető ellenállás-csökkenés mértéke a hőmérséklettel kissé nő.

130 °C-tól kezdve csak ellenállás-csökkenést tapasztaltunk, amelynek mértéke a hőmérséklettel monoton növekedett.

A 480 °C-ról edzett minták folyáshatárának változását megvizsgáltuk 20 és 200 °C közötti hőkezelések hatására. A 2 órás hőkezelésekhez tartozó folyáshatár értékeket a hőmérséklet függvényében a 38. ábra mutatja. Ugyanezen az ábrán feltüntettük a különböző hőmérsékleteken 2 óra alatt elérhető térfogati hányadot és fajlagos elektromos ellenállás változást is. Látható, hogy mindhárom mennyiség kb. 50 °C-nál éri el a legnagyobb értéket 2 óra alatt. 60 és 100 °C között mindhárom mennyiség csökkenése figyelhető meg. 100 és kb. 160 °C között f és $R_{p0,2}$ alig változik és $\Delta\rho$ csökkenése is lassúbb. 160 °C fölött valamennyi paraméter erőteljes csökkenése figyelhető meg.

Korábbi vizsgálatok eredményeit is figyelembe véve [16, 24, 25, 43, 133–136], méréseink alapján a szilárd oldat szétesését a hőmérséklet szerint három tartományra oszthatjuk fel a vizsgált ötvözet esetében.

Szobahőmérséklet és mintegy 70 °C között GP zónák keletkezése a döntő folyamat. 80 és 110 °C között a szilárd oldat szétesése zónaképződéssel megy végbe ugyan, de az itt képződő zónák mérete arra utal, hogy ezek GPII zónák (lásd a 4.3.1. pontban). Ezek a zónák, mint azt a 4.3.1. pontban megmutattuk, képesek átnőni az η' fázis részecskéibe. 120 °C felett a szilárd oldat szétesése az η' átmeneti fázis nukleációjával és növekedésével szűnik meg. Ilyen hőmérsékleteken zónaképződés már nem figyelhető meg ebben az ötvözetben.



38. ábra

90 és 110 °C között az ötvözet ellenállása, amint azt a 37. ábrán láttuk, kezdetben kismértékben csökken. Ez arra utal, hogy a GPII zónák kialakulását megelőzi egy olyan folyamat, amely során vagy a befagyasztott többletvakanciák kitemperálódnak, vagy valamelyik ötvözőből kis atomcsoportok keletkeznek, vagy esetleg mindkét folyamat együttesen zajlik le. Ugyanilyen ellenállásminimumot figyeltünk meg a szennyezőmentes 8. számú ötvözetben is, ami arra utal, hogy ez a jelenség nem származhat a 9. ötvözet valamelyik szennyezőjétől.

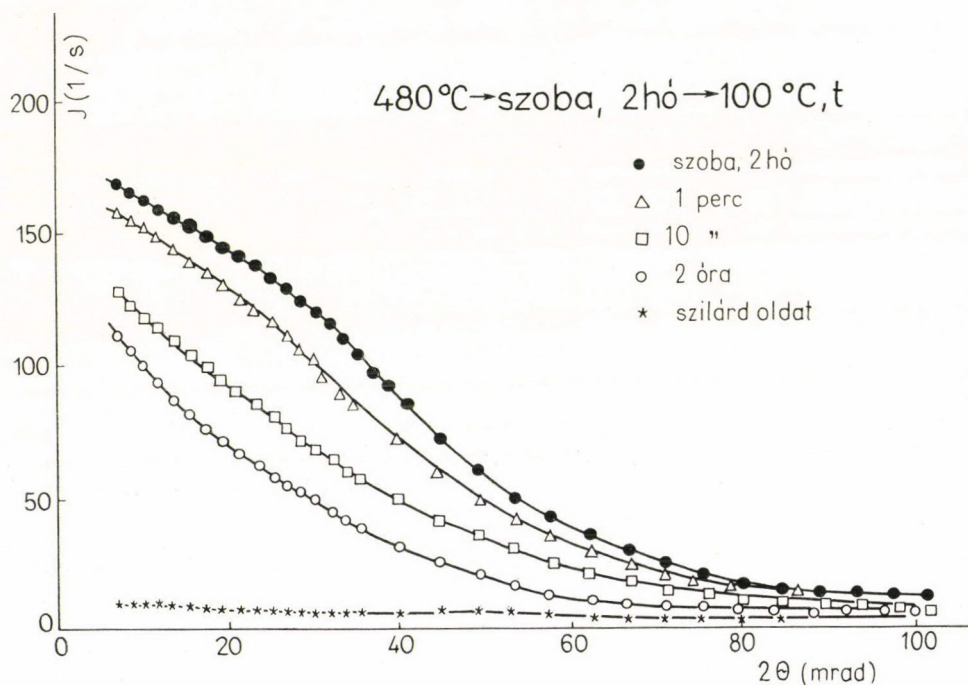
Kovács—Csetényi és Groma [137] megmutatták, hogy az ellenállás-minimum nem figyelhető meg, ha az edzés közvetlenül az öregítési hőmérsékletre történik. Figyelembe véve, hogy Al alapú ötvözetekben szobahőmérsékletre történő edzésnél nagyszámú diszlokációhurok képződik, amelyek kedvező magképző helyül szolgálnak mindenfajta részecske kialakulása szempontjából, ugyanakkor mintegy 70 °C fölötti hőmérsékletekre történő edzésnél nem képződnek diszlokációhurok [138, 139], könnyen elképzelhető, hogy a szobahőmérsékletre edzett, majd 90 és 110 °C között hőkezelt mintákban megindul bizonyos η' képződés a meglévő diszlokációhurokon. Ezzel egy időben azonban végbemegy a GPII képződés bizonyos inkubációs periódus után, ami végül az ellenállás és a KRSZ növekedését eredményezi. Ennek a jelenségnek a pontosabb tisztázása azonban további vizsgálatokat igényel.

5. Szobahőmérsékleten kialakuló GP zónák reverziója

A közepes szilárdságú Al—Zn—Mg ötvözetekben alacsony hőmérsékleteken kialakuló GP zónák magasabb hőmérsékleteken instabillá válnak és feloldódnak még mielőtt a magasabb hőmérsékleteken stabil η' , vagy η fázisok részecskéi kialakulhatnának. Ilyenkor az alacsony hőmérsékletű nemesedés során kialakuló valamennyi fizikai tulajdonság, a folyáshatár, elektromos ellenállás növekedés, KRSZ, mágneses szuszceptibilitás stb. visszaáll a szilárd oldatnak megfelelő vagy közel annak megfelelő értékre. Ez a reverzió jelensége. Ugyanakkor a magasabb hőmérsékleteken keletkező metastabil, vagy stabil fázisok nukleációja, diszperzitása és méreteloszlása döntő mértékben függ az ötvözet előéletétől. Hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés után a 160°C körül kialakuló η' fázis részecskéinek diszperzitása 2 nagyságrenddel nagyobb lehet, mint az oldó hőkezelés után, szilárd oldat állapotból azonnal 160°C -on hőkezelt mintában [132, 136].

A szobahőmérsékleti zónák tehát látszólag teljesen feloldódnak egy reverziós hőkezelés során, de mégis döntően megváltoztatják az η' átmeneti fázis nukleációját.

A szobahőmérsékleti zónák reverzióját és a reverzió hatását az η' fázis kialakulására részletesen vizsgáltuk a 8. és 9. típusú ötvözetekben.

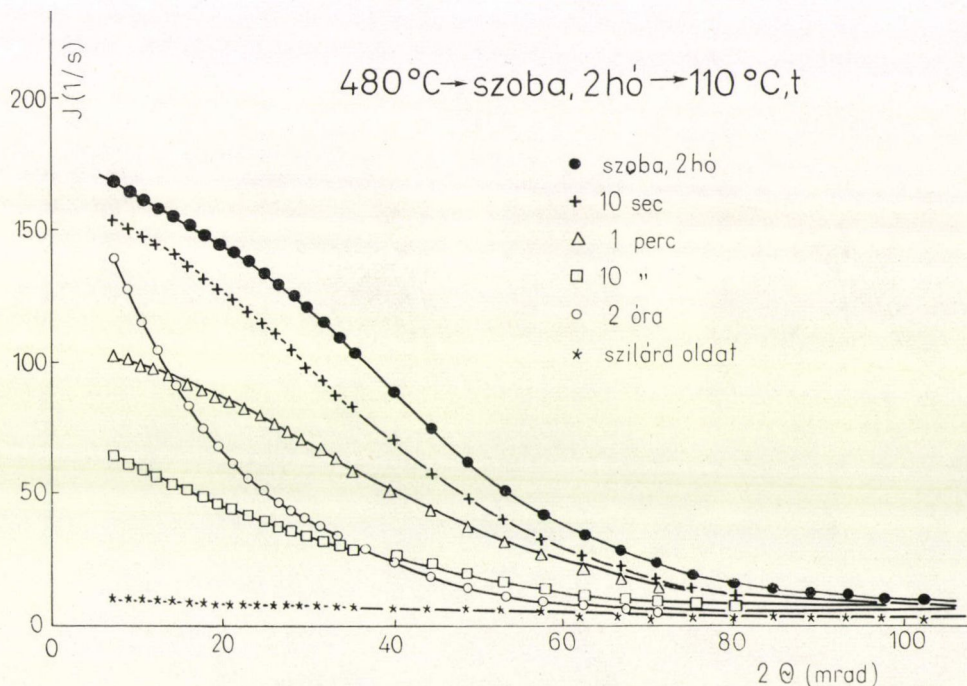


39. ábra

5.1. Szobahőmérsékleti GP zónák reverziója az Al—1,33 at%Zn—2,42 at%Mg ötvözetben [135, 136]

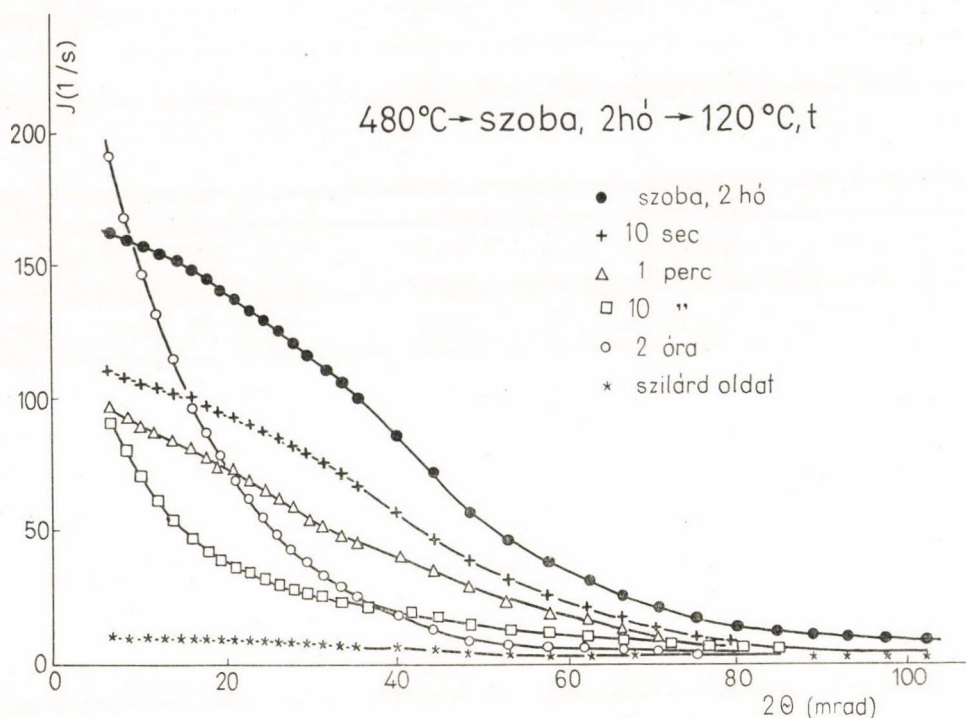
Vizsgálatainkat a Fe, Si, Mn és Ti mikroötvözőket tartalmazó 9. ötvözetben végeztük. A mintákat 480 °C-os oldó hőkezelés után szobahőmérsékletre edzettük, majd szobahőmérsékleten 2 hónapig hevertettük. A 11. és 13. ábrák tanúsága szerint, más vizsgálatok eredményeivel egybehangzóan [60] ez az időtartam elegendő a szobahőmérsékleti egyensúlyi állapot eléréséhez. A hevertetett mintákat 50 és 200 °C között különböző hőmérsékleteken 10 sec, 1 perc, 10 perc és 2 órás hőkezeléseknek vetettük alá.

A 100 és 160 °C között a fenti időtartamokig hőkezelt minták kisszögű röntgen-szórásának intenzitáseloszlás (IE) görbéi a 39—44. ábrákon láthatók. 100 °C-on 10 sec alatt az IE görbe nem változik meg észrevehetően a kiindulási állapotnak (k.á.) megfelelő IE görbéhez képest (39. ábra). 1 perc, vagy annál hosszabb idejű



40. ábra

hőkezelés során azonban a szórt sugárzás intenzitása monoton csökken, bár 2 óra után is még jelentős marad. 110 °C-on (40. ábra) már 10 sec alatt csökken a szórt sugárzás intenzitása és 10 perces hőkezelés után alakul ki a legalacsonyabb IE görbe. A 2 órás hőkezelés után kapott IE jelentősen eltér a rövidebb idejű hőkezelésekhez tartozó IE görbétől. Lefutása meredekebb és a kis szögeknél nem észlelhető a részcscák közötti interferencia effektus.



41. ábra

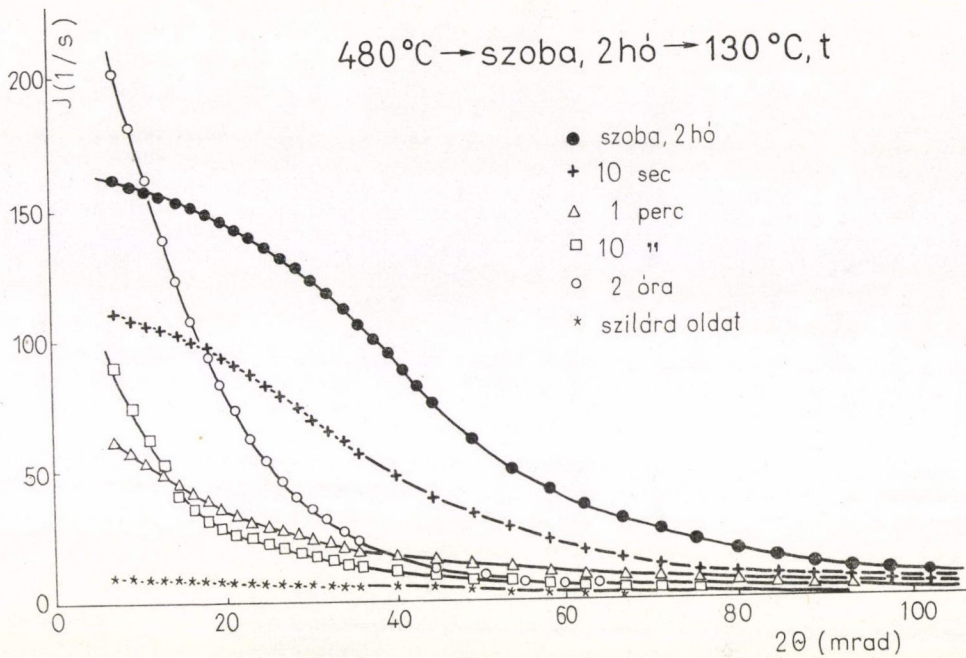
120°C -on (41. ábra) már 10 sec után jelentősen csökken a szórt intenzitás. A legalacsonyabb IE görbe itt is a 10 perces hőkezeléshez tartozik, de már ezen az IE görbén sem észlelhető a részecskék közötti interferencia effektus.

130°C -on (42. ábra) a 10 sec-os hőkezelés hatása megegyezik a 120°C -os hasonló idejű hőkezelés hatásával, ugyanakkor 1 perc alatt az IE görbe megközelíti a szilárd oldathoz tartozó IE görbét és alig tér el a 10 perces hőkezelés után kapott IE görbétől.

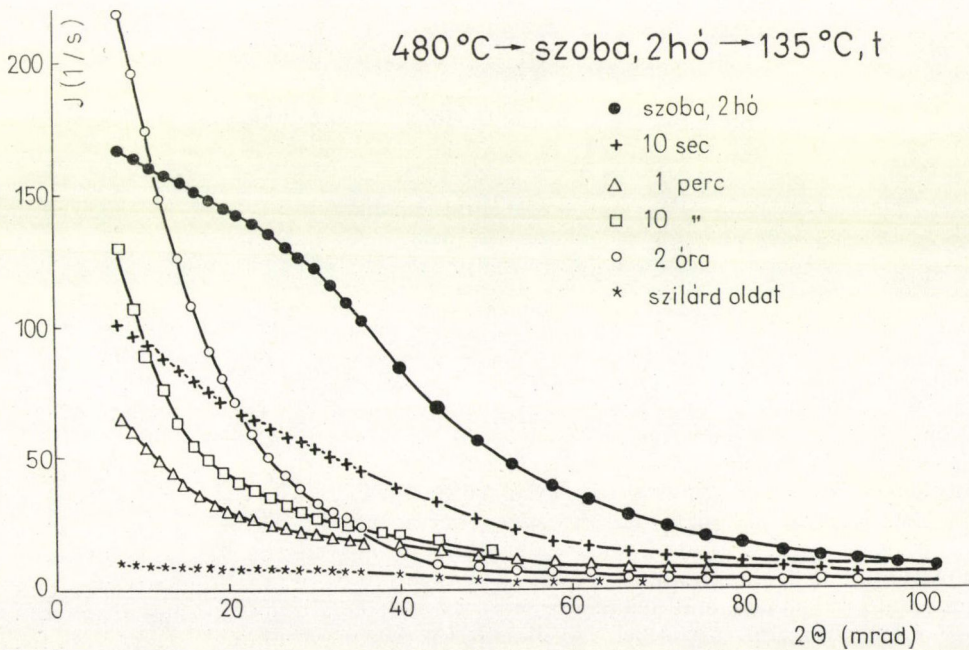
135°C -on (43. ábra) a reverzió folyamata lényegesen megváltozik. 1 perc alatt az IE görbe eléri a legalacsonyabb értékeket és már 10 sec után megszűnik a részecskék közötti interferencia effektus. 10 perces hőkezelés után pedig jelentős intenzitás-növekedés tapasztalható, az η' fázis részecskéire jellemző meredek lefutású IE görbével.

160°C -on (44. ábra) az IE görbe már 10 sec után leesik a szilárd oldathoz tartozó IE görbével. 2 órás hőkezelés után pedig az IE jelentős η' képződésről tanúskodik.

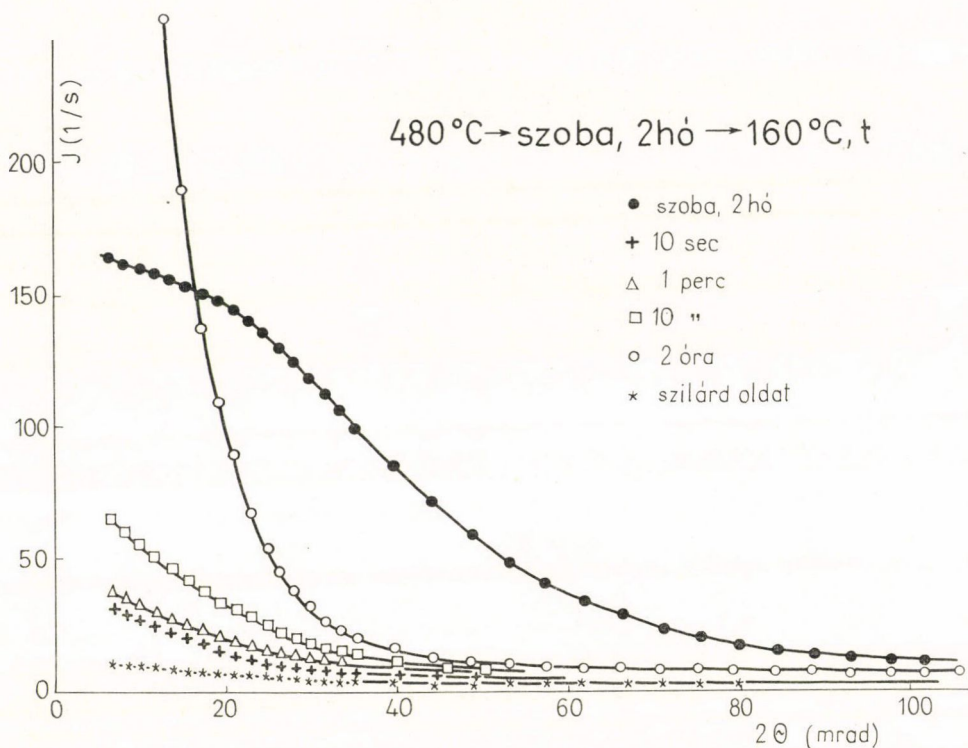
A 45. ábrán feltüntettük a különböző hőmérsékleteken 1 percig hőkezelt minták IE görbéit. Látható, hogy 100°C -ig 1 perc alatt alig csökken a szórt intenzitás. 110 és 120°C -on az intenzitás-csökkenés már jelentős, ugyanakkor megfigyelhető, hogy 120°C 1 perc után a részecskék közötti interferencia effektus lényegesen kisebb,



42. ábra



43. ábra



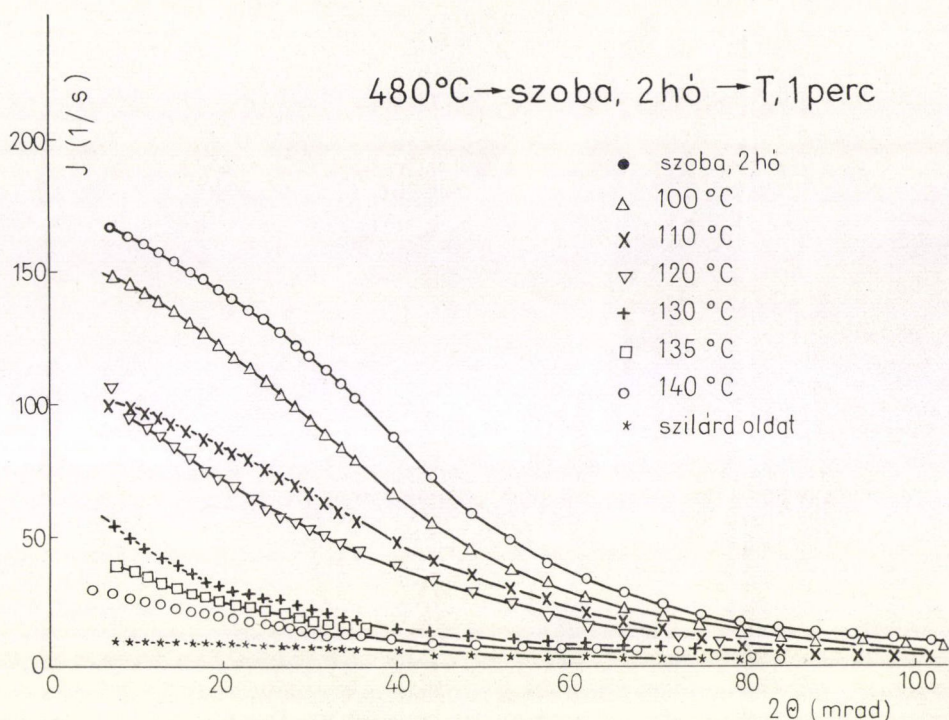
44. ábra

mint 110°C 1 perc után. 130°C felett 1 perc alatt az IE görbék megközelítik a szilárd oldatállapotnak megfelelő IE -t, növekvő hőmérséklettel egyre nagyobb mértékben.

130°C -nál alacsonyabb hőmérsékleteken a szobahőmérsékleti GP zónák rövid idejű (1 perc v. annál rövidebb) hőkezeléssel szemben stabilak. Feloldódásuk, illetve reverziójuk nem jelentős, amint ez a 39–41. és 45. ábrákból kitűnik. 130°C felett azonban a zónák feloldódása 1 percen belül bekövetkezik, ami a 42–45. ábrákon jól látható.

A 46. ábrán a különböző hőmérsékleteken 2 órát hőkezelt minták IE görbéit tüntettük fel. Látható, hogy az IE görbék jellege 100°C -ig hasonló, mint a szobán 2 hónapig hevertetett mintáé. A részecskék közötti interferencia effektus még 100°C 2 órás hőkezelés után is megfigyelhető. 120°C -on és magasabb hőmérsékleteken az IE görbék jellege teljesen megváltozik. Eltűnik az interferencia effektus és az IE meredeken fut le a mintában kialakuló nagymértékű kiválásoknak megfelelően.

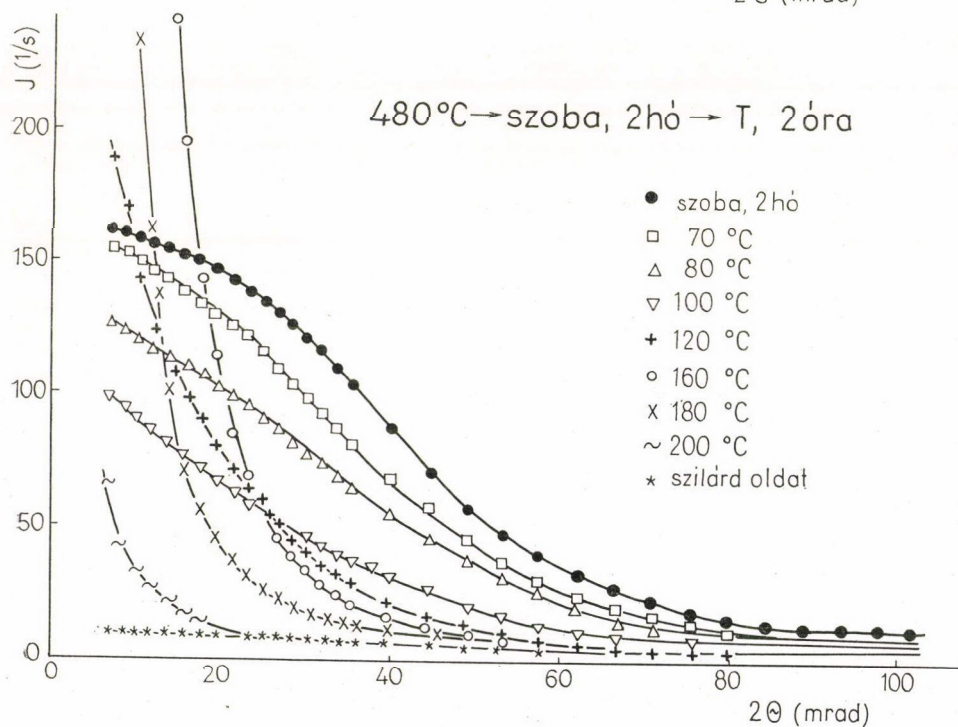
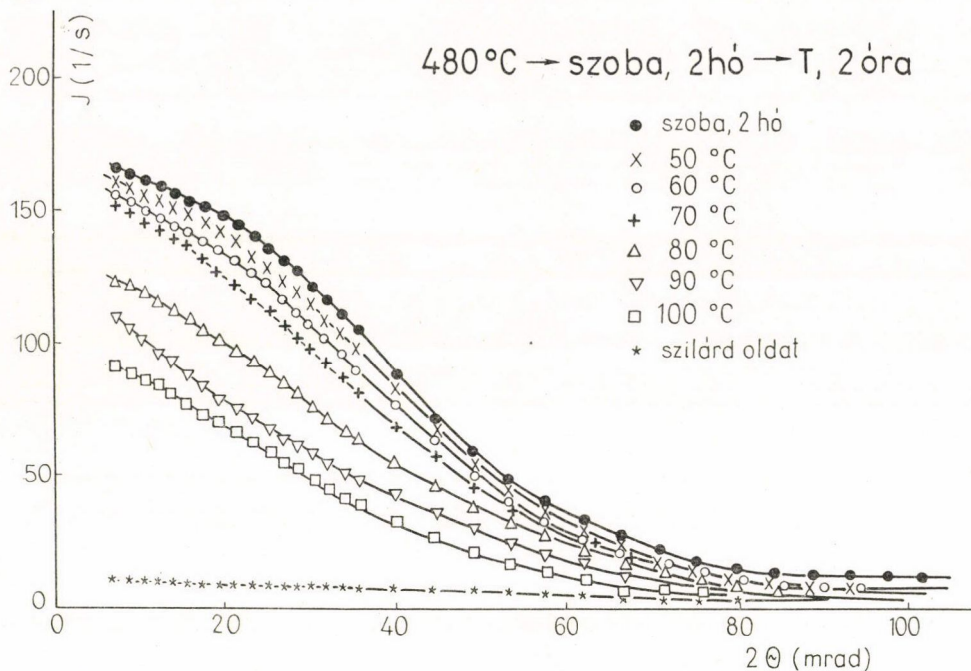
Az IE görbék alapján a (24) kifejezés szerint meghatároztuk a szórt sugárzás integrális intenzitását, amit a hőmérséklet és az idő függvényében a 47–48. ábrákon tüntettünk fel. A 47. ábrán látható, hogy Q értéke 110°C -ig monoton csökken a hőkezelés 2 órás időtartamán belül. A csökkenés mértéke a hőmérséklettel növekszik. 120°C -on Q az első 10 percen erőteljesen csökken, majd állandó értéket vesz fel. 130°C felett a kezdeti hirtelen csökkenés és minimum elérése után Q monoton növe-



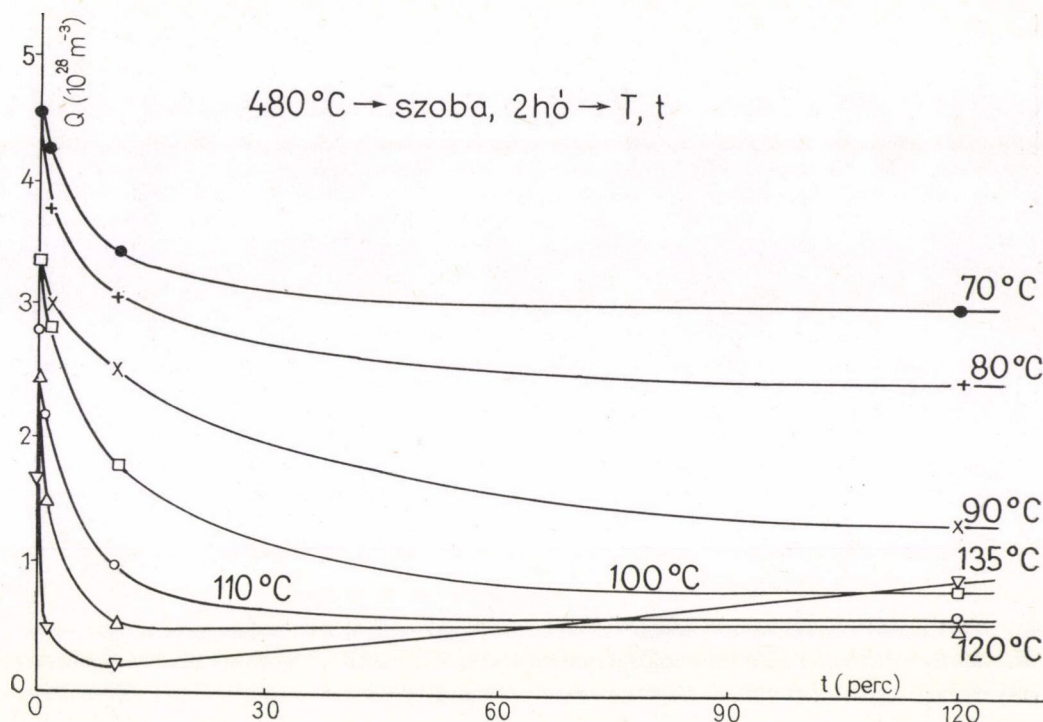
kedése figyelhető meg (48. ábra). A növekedés mértéke 160°C -on a legnagyobb. Q kezdeti hirtelen csökkenése a szobahőmérsékleti zónák feloldódását, ezt követő növekedése pedig az η' átmeneti fázis kialakulását mutatja.

A különböző idejű hőkezelésekhez tartozó Q értékeket a hőmérséklet függvényében a 49. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy már a 10 perces hőkezelésekhez tartozó görbén egy enyhe maximum jelenik meg 140°C körül annak megfelelően, hogy már ennyi idő alatt is van szembeutúnó η' képződés ilyen hőmérsékleteken. A 2 órás görbén az η' képződés egyértelműen megfigyelhető és 160°C körül a legerőteljesebb.

Az eddigi eredmények alapján a szobahőmérsékleti zónák reverziós hőmérsékletét a következő megfontolások alapján becsülhetjük meg. Az η' fázis kialakulása különböző hőmérsékleteken más-más inkubációs idővel megy végbe, amelyek a TTT diagramban egy jellegzetes C görbét adnak. A szilárd oldatból történő η' képződés inkubációs periódusaihoz tartozó hipotetikus C görbét az 50. ábrán $\eta'_{\text{sz.o.}}$ -val jelöltük. Az előzetesen szobahőmérsékleten hevertetett mintát a GP szolvusz hőmérséklete fölé helyezve az η' képződés homogénen eloszól, előre meglevő magképző helyeken nagyobb sebességgel nukleálódik. Eszerint az inkubációs periódusoknak megfelelő C görbe (az ábrán η'_{GP}) erőteljesen eltolódik a rövidebb idők tartományába. A GP zónák feloldódása és az η' fázis részecskéinek nukleációja egymással versenyben levő folyamatok. A GP zónák szolvusz hőmérséklet feletti feloldódásának időigényét jellemezhetjük valamilyen τ időállandóval, ami a szolvusz hőmérsékleten igen



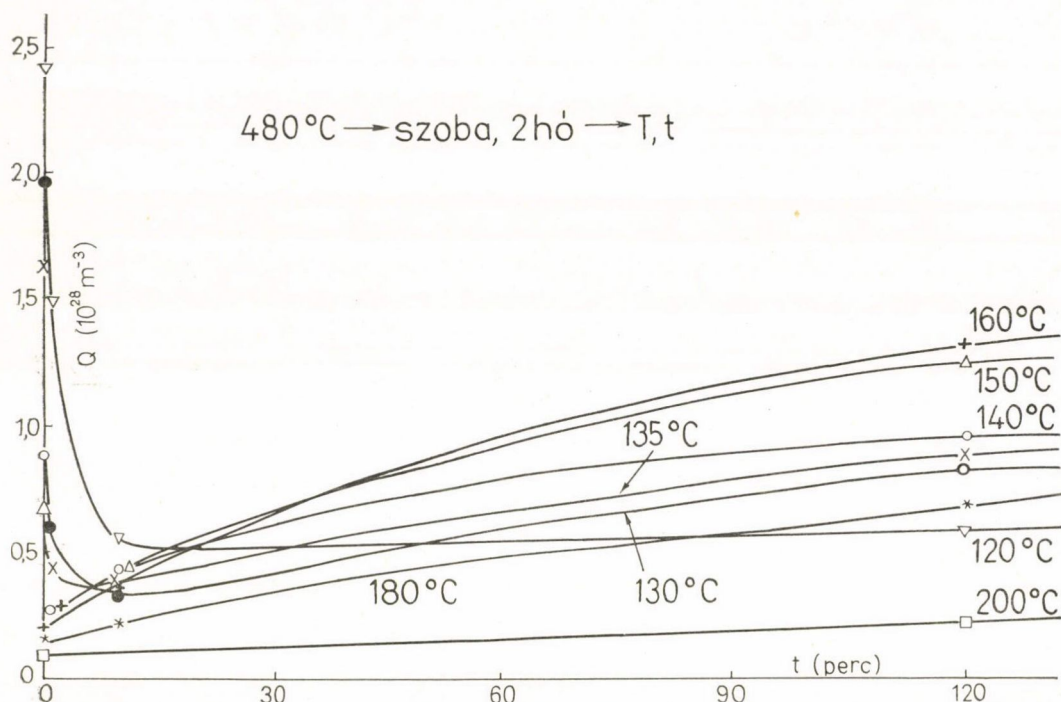
46. ábra



47. ábra

hosszú és nyilván növekvő hőmérséklettel egyre rövidebb. (Az ábrán τ -val jelöltük a zónaoldódás időállandójának sematikus hőmérsékletfüggését.) Olyan hőmérsékleteken, ahol τ hosszabb, mint az η' magképződésének inkubációs periódusa, a zónák feloldódása közben megindul az η' képződés. Ilyen esetben az ötvözet fizikai tulajdonságait jellemző paraméterek megváltoznak ugyan az alkalmazott hőkezelés során, de lényegesen különböznek maradnak a szilárd oldatnak megfelelőtől. Azt mondhatjuk, hogy az ötvözet reverziója ezeken a hőmérsékleteken csupán részleges. Az 50. ábrán látható, hogy az η'_{GP} és a τ görbék metszhetik egymást. Amennyiben a reverziós hőkezelés hőmérséklete magasabb a metszéspontnak megfelelő hőmérsékletnél, a GP zónák teljesen feloldódnak az η' képződés megindulása előtt, a reverzió ilyenkor teljes. Az ötvözet valamennyi fizikai paramétere visszaesik a szilárd oldatnak megfelelő érték közelébe. Az η'_{GP} és a τ görbék metszéspontja (50. ábra) meghatároz egy hőmérsékletet és egy időtartamot. Ez a legalacsonyabb hőmérséklet, amelyen az ötvözet teljes reverziója bekövetkezhet jelentős η' képződés nélkül, ezt tekintjük a szobahőmérsékleti zónák T_R reverziós hőmérsékletének. A hozzá tartozó t_R időtartam a reverzió lejátszódásához szükséges idő, ami a T_R hőmérsékleten egyben az η' képződés inkubációs periódusa is.

Vizsgálataink alapján a T_R reverziós hőmérsékletet 135°C-nak és a hozzá tartozó t_R időtartamot 1 percnak találtuk. A 49. ábrán látható ugyanis, hogy az 1 perces

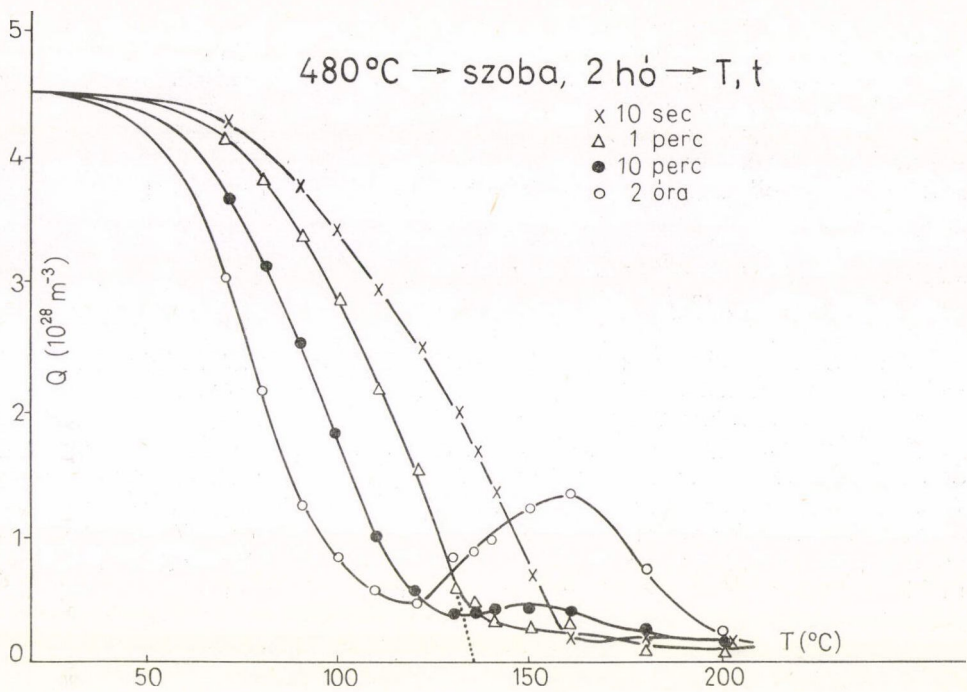


48. ábra

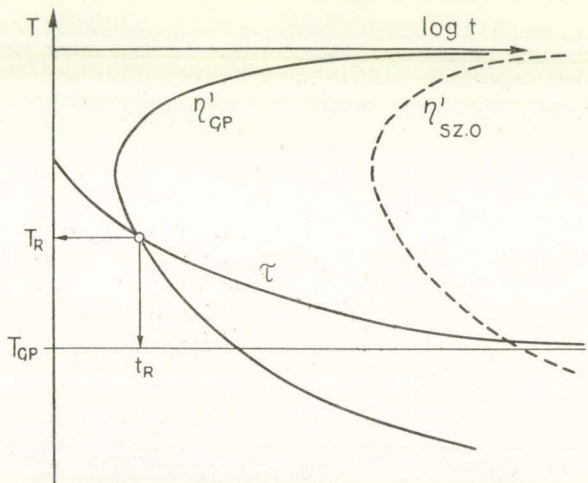
görbén még nem észlelhető az η' képződésnek megfelelő maximum 140 és 160 °C között, ami a 10 perces görbén már jól megfigyelhető.

A 46. ábrán látható, hogy 70 °C 2 órás hőkezelés után az *IE* görbe alig változik meg a kiindulási *IE* görbéhez képest. Még 80 °C 2 óra után is csak kismértékű intenzitás-csökkenés tapasztalható. Az integrál intenzitás (47. ábra) egy kezdeti csökkenés után, ugyancsak viszonylag magas értéken marad. Ugyanakkor 90 °C-on 2 óra alatt már jelentős integrál intenzitás-csökkenés tapasztalható. 70, illetve 80 °C-on 2 óra alatt a Guinier sugarak a kezdeti 1,1 nm-ről 1,4, illetve 1,5 nm-re növekszenek, ami arra utal, hogy az ötvözet zónás állapota megmarad, csupán a zónák átlagmérete nő meg. Q csökkenése azt mutatja, hogy egy bizonyos R_{kr} kritikus méretnél kisebb zónák instabillá válnak a magasabb hőmérsékletű hőkezelés során és feloldódnak. Ezáltal az átlagméretük növekszik és integrális intenzitásuk csökken. Ez a folyamat játszódik le, mintegy 80 °C-ig. Ennek alapján a szobahőmérsékleti zónák stabilitási (vagy szolvusz) hőmérsékletét 80 °C-nak becsültük.

100 °C-nál magasabb hőmérsékleteken a zónák kezdeti feloldódása után megfigyelhető az η' fázis képződése. Mintegy 130 °C-ig az η' képződés előbb megindul jelentős mértékben, mint ahogy a zónák oldódása befejeződnék. Ilyenkor a reverzió, mint mondtuk, csak részleges. 135 °C-on és magasabb hőmérsékleteken a zónaoldódás befejeződik az η' képződés számottevő megindulása előtt, ilyen hőmérsékleteken a reverzió teljes.



49. ábra

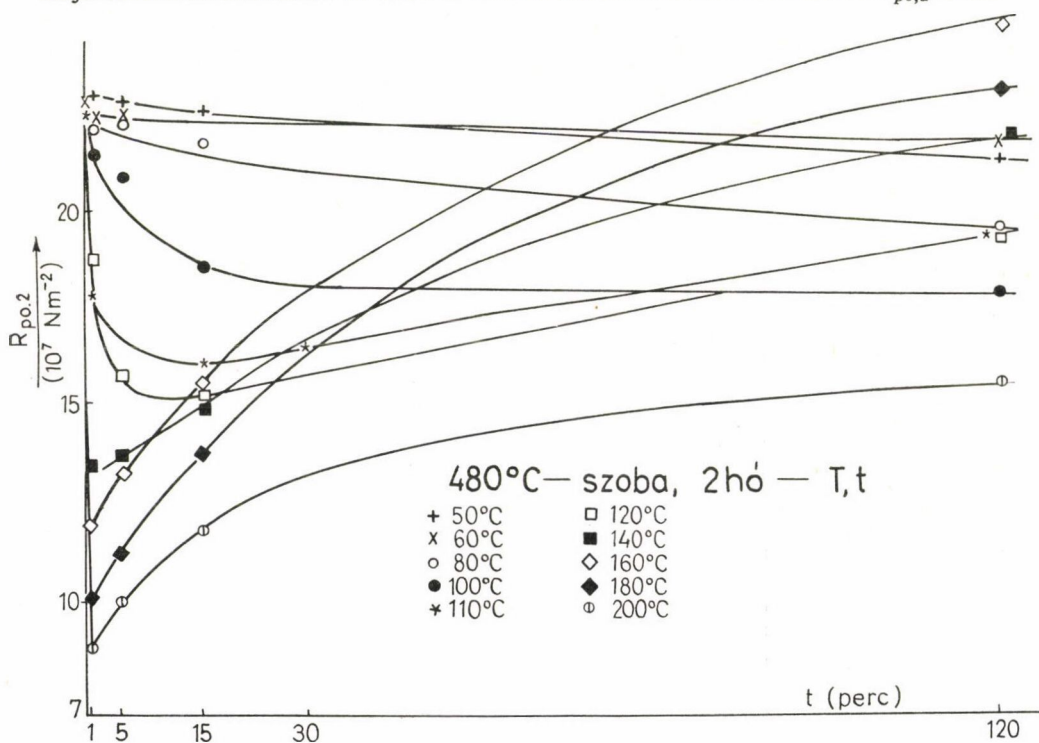


50. ábra

A GP szolvusz és a reverziós hőmérsékletek ismerete a több lépcsős hőkezelések szempontjából igen lényeges. Az ilyen hőkezelések rendszerint egy szobahőmérsékleti hevertetésből (1. lépcső), egy magasabb hőmérsékletű, stabilizáló (2. lépcső) és egy η' fázisra nemesítő 140—180 °C közötti végső hőkezelésből (3. lépcső) állnak. A 2. lépcső célja a nagy diszperzitású, szobahőmérsékleti zónák stabilizálása. Egy ilyen hőkezelés hőmérsékletét nyilvánvalóan a GP szolvusz és a reverziós hőmérséklet közötti értékre kell megválasztani, a jelen ötvözet esetében 80 és 130 °C között.

5.2. A reverzió hatása az η' fázis nukleációjára az Al—1,33 at%Zn—2,42 at%Mg ötvözetben [135, 136]

Az η' átmeneti fázis részecskéinek diszperzitását és méreteloszlását erőteljesen befolyásolja az ötvözet előélete. Ugyanakkor láttuk, hogy 135 °C-nál magasabb hőmérsékleteken az ötvözet KRSZ-a 1 percen belül lecsökken a szilárd oldat állapotának megfelelő értékre. Ugyanilyen viselkedést mutat az ötvözet fajlagos elektromos ellenállása [140]. Ezzel szemben az ötvözet folyáshatárának reverziója 140 °C felett növekvő hőmérséklettel növekszik. Az 51. ábrán a szobán 2 hónapig hevertetett minták folyáshatára látható a reverziós hőkezelések hőmérsékletének és idejének függvényében. Megfigyelhető, hogy 140 °C-on $R_{p0,2}$ 1 percen belül leesik mintegy 13,5 kp/mm²-re, majd monoton növekszik az idővel. Hasonlóan éles minimumot mutat $R_{p0,2}$ a ma-



51. ábra

gasabb hőmérsékletű reverzió során, az 1 perchez tartozó minimumok azonban jelentősen csökkennek a hőmérséklet növelésével.

Figyelembe véve, hogy mind a KRSZ, mind az elektromos ellenállás mérések a szobahőmérsékleti zónák teljes reverziójáról tesznek tanúságot, az $R_{p0,2}$ minimumának csökkenése a revertáló hőkezelés hőmérsékletének növekedésével annak tulajdonítható, hogy a reverzió során a GP zónák helyén igen kis méretű ötvöző atom klaszterek maradnak vissza. Ezek a klaszterek kis méretük és homogén eloszlásuk miatt nem okoznak sem észlelhető KRSZ-t, sem pedig elektromos ellenállás-változást a szilárd oldatállapothoz képest. Ugyanakkor a klaszterek diszlokációkkal való kölcsönhatásuk révén jelentős folyáshatár növekedést tudnak előidézni. A klaszterek mérete és térfogati hányada nyilván csökken növekvő hőmérséklettel, ami az $R_{p0,2}$ minimális értékének csökkenésében nyilvánul meg.

A reverzióval előálló állapotot ezek alapján egy „kvázi szilárd oldat” állapotnak tekinthetjük, amelyben a fel nem oldódott ötvöző atomcsoportok (amelyek a GP zónák helyén maradtak vissza) kedvező magképző helyül szolgálnak az η' fázis nukleusai számára.

5.3. A reverzió mechanizmusa és hatása az η' fázis kialakulására az alacsonyán ötvözött Al—Zn—Mg ötvözetekben [141]

Mind az alacsony hőmérsékleteken keletkező GP zónák, mind a közepes hőmérsékleteken kialakuló η' fázis metastabil fázisok, így mind nukleációjuk, mind egyensúlyi diszperzitásuk és méreteloszlásuk az ötvözet előéletének a függvényei. Különösen bonyolult folyamat az η' átmeneti fázis nukleációja és egyensúlyi állapotának kialakulása. Ugyanakkor az η' fázisnak köszönhető az ötvözetrendszer kedvező mechanikai tulajdonságai. Nem véletlen tehát, hogy az ötvözetrendszerrel kapcsolatos csaknem valamennyi dolgozatban felmerül az η' fázis kialakulásának kérdése [16—76]. Az irodalomban eltérő nézetek találhatók arra nézve, hogy az előzetesen kialakuló GP zónák milyen szerepet játszanak az η' fázis részecskéinek kialakulásában egy magasabb hőmérsékletű hőkezelés során [3, 43, 67, 69, 135, 136, 140, 142, 143]. Ezek a nézeteltérések arra vezethetők vissza, hogy milyennek tekintjük az alacsonyabb hőmérsékleteken keletkező GP zónák reverziójának mechanizmusát [16, 43, 67, 69, 135, 136]. Ebben a fejezetben, részben saját, részben irodalmi eredmények elemzése alapján megmutatjuk, hogy mind a reverzió, mind a reverziónak az η' fázis magképződésére gyakorolt hatása alapvetően megváltozik, ha az ötvözet Zn tartalmát egy kritikus Zn koncentráció fölé növeljük.

3. TÁBLÁZAT

Ötvözet jele	x (Zn) at %	y (Mg) at %
10	4,5	2,0
11	4,5	3,0
12	3,0	2,0
13	3,0	3,0
14 [60]	2,8	1,32
15 [37]	2,48	2,26
16 [43]	2,5	3,2

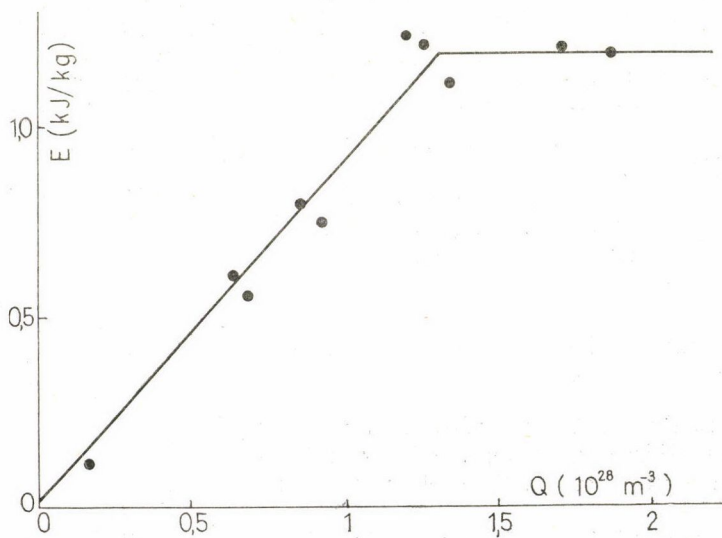
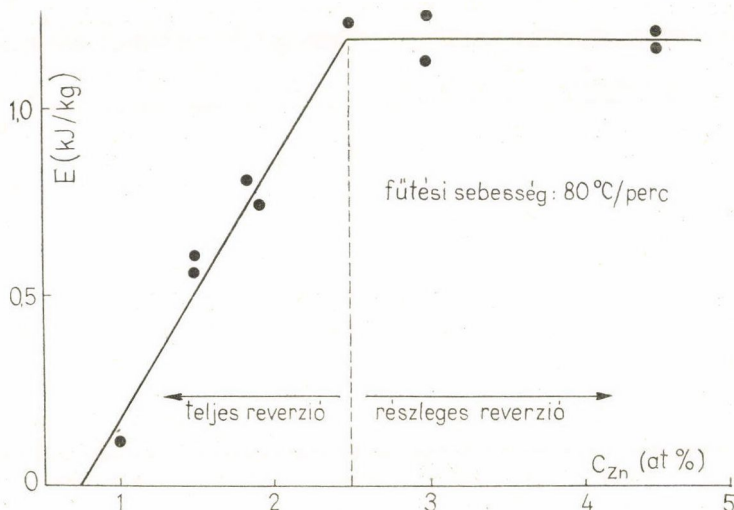
5.3.1. Reverziós vizsgálatok különböző Zn tartalmú Al—Zn—Mg ötvözeteken

Megvizsgáltuk a T_R reverziós hőmérsékletet egyrészt az 1. táblázatban (4. fejezet) felsorolt ötvözeteken, másrészt a 3. táblázatban felsorolt ötvözeteken.

Ez utóbbi ötvözetek 99,99% tisztaságú Al-ból készültek.

A szobahőmérsékleti GP zónák reverziójának vizsgálatához a 480°C -on 30 percig oldó hőkezelt mintákat szobahőmérsékletű vízbe edzettük, majd szobahőmérsékleten 2 hónapig hevertettük.

A szobahőmérsékleten hosszú idő alatt keletkező GP zónák mennyiségét kétféle módon határoztuk meg. Egyrészt a KRSZ integrális intenzitásából, másrészt egy Perkin—Elmer DSC—2 kaloriméterben történő folyamatos fűtés során kapott oldáshőből. Ez utóbbi méréseknél a fűtési sebességet $80^\circ\text{C}/\text{perc}$ -nek választottuk,



52. ábra

amely tapasztalataink szerint elegendően gyors ahhoz, hogy a mérés során új fázisok keletkezése ne játszódjon le az ötvözetben. Mások hasonló ötvözeteken végzett kaloriméteres vizsgálatainak alátámasztják ezt a feltevést [144].

Az E oldáshő a különböző ötvözetek Zn tartalmának függvényében, valamint az oldáshő a Q integrális intenzitás függvényében az 52. ábrán látható. Az a meglepő eredmény adódik, hogy E , mintegy 2,5 at% Zn tartalomig lineárisan nő az ötvözet Zn tartalmával, majd konstans értéket mutat. Hasonló viselkedés tapasztalható az E — Q összefüggésben. A 4. fejezet eredményei alapján tudjuk, hogy az itt vizsgált ötvözetekben a szobahőmérsékleti zónák egyensúlyi Zn koncentrációja mindig 42 at%. Ez a (30) kifejezés alapján azt jelenti, hogy a zónák térfogati hányada arányos az integrális intenzitással, ami az ötvözet Zn tartalmával monoton növekszik. Ennek alapján az oldáshőnek a $C_R=2,5$ at% Zn tartalomnál bekövetkező hirtelen telítődése csak azzal magyarázható, hogy a C_R -nél nagyobb Zn tartalmú ötvözetekben a szobahőmérsékleti zónák csak egy bizonyos része oldódik fel a felfűtés vagy reverziós hőkezelés során.

Az 5.1.—5.2. fejezetekben 2,5 at%-nál kisebb Zn tartalmú ötvözetek reverzióját vizsgáltuk és láttuk, hogy a szobahőmérsékleti zónák teljesen feloldódnak a reverzió során. Ugyanakkor számos irodalmi eredmény utal arra, hogy a 2,5 at%-nál nagyobb Zn tartalmú ötvözetekben a szobahőmérsékleti zónák reverziója csak részleges [43, 67, 71, 128]. Ez abban nyilvánul meg, hogy az ilyen ötvözetekben a különböző fizikai tulajdonságoknak a reverzió során bekövetkező csökkenése a zónák által okozott növekedésnek csupán bizonyos százaléka.

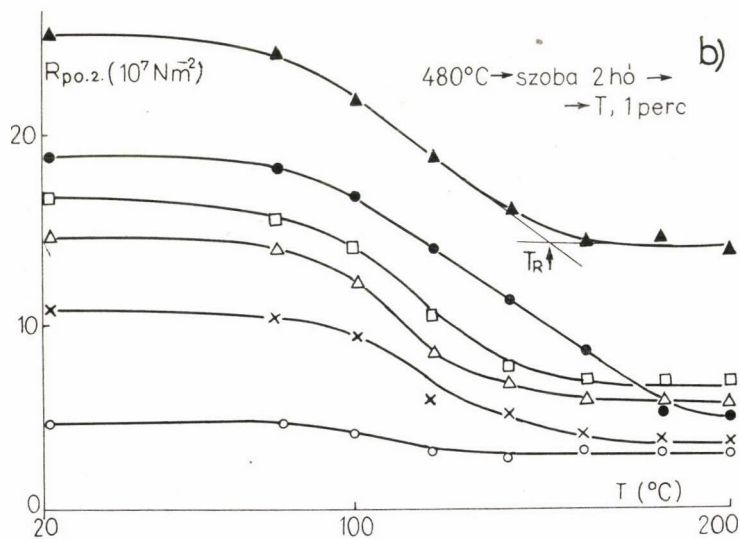
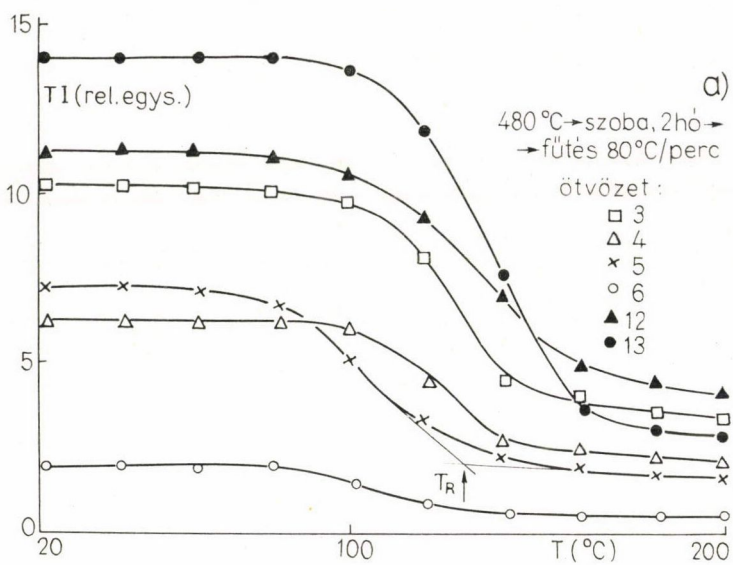
Érdemes megjegyezni, hogy hasonló észrevétel már korábban szerepel Gerold és munkatársai [67] egy dolgozatában, amely szerint 2 at%-nál kisebb Zn tartalmú ötvözetekben a reverzió teljes és a 4 at%-nál nagyobb Zn tartalmú ötvözetekben a reverzió csak részleges.

A KRSZ teljes intenzitásának (TI) „in situ” mérésével (lásd 3.1.2. fejezetet), valamint a mechanikai tulajdonságok alapján meghatároztuk a vizsgált ötvözetekben a szobahőmérsékleti zónák reverziós hőmérsékletét.

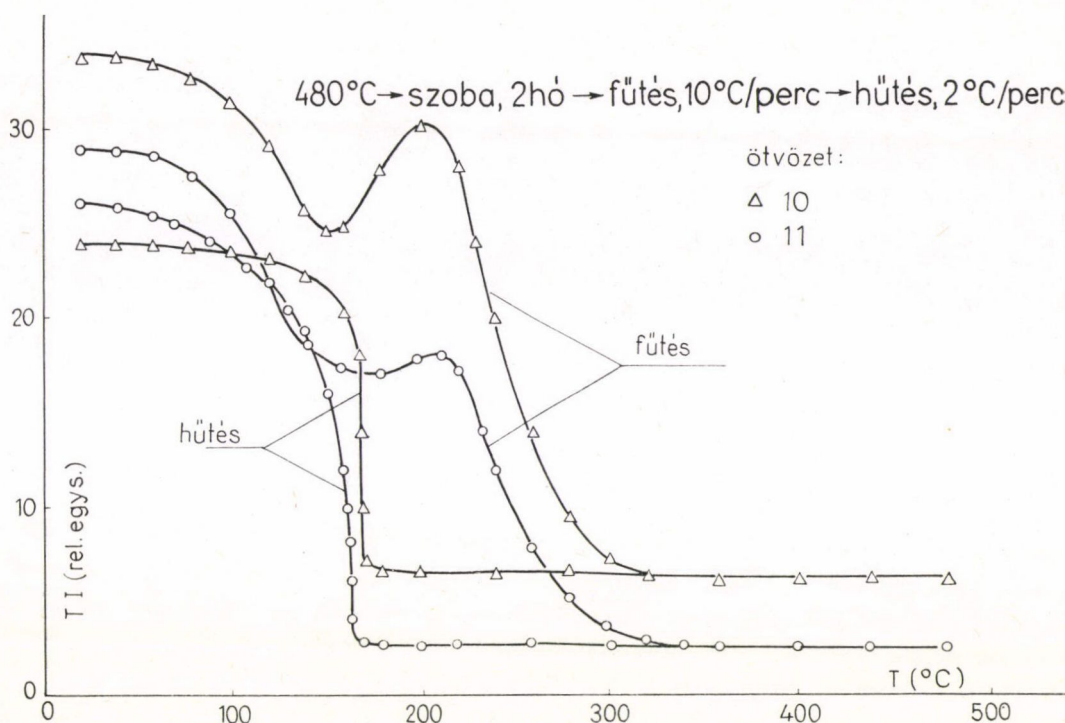
A teljes intenzitás változását $80^\circ\text{C}/\text{perc}$ fűtési sebesség mellett az 53a. ábra mutatja néhány jellegzetes esetben. Itt jegyezzük meg, hogy TI változását megvizsgáltuk különböző fűtési sebességek mellett és kvalitatívan a 49. ábrához hasonló viselkedést tapasztaltunk. $20^\circ\text{C}/\text{perc}$ fűtési sebesség mellett már jelentős η' képződést tapasztaltunk, $80^\circ\text{C}/\text{perc}$ -nél nagyobb fűtési sebességeknél viszont a zónaoldódás csak nagyon magas hőmérsékleteken indult meg.

A folyáshatár változása, 2 hónapos hevertetést követő, különböző hőmérsékletű 1 perces hőkezelések hatására az 53b. ábrán látható. A T_R reverziós hőmérséklet meghatározását az 53. ábrán szemléltetett módon végeztük el. Az így meghatározott reverziós hőmérsékletek a 4. táblázatban találhatók.

A 2,5 at%-nál nagyobb Zn tartalmú ötvözeteknél a részleges reverzió jól látható a folyamatos felfűtéssel végzett KRSZ vizsgálatokon (54. ábra). A hőmérséklet növekedésével TI kezdetben csökken a szobahőmérsékleti zónák oldódásának megfelelően. 160 — 170°C között minimumot ér el, majd növekszik az η' fázis kialakulásával. A hőmérséklet további növekedésével TI egy maximumon áthaladva erőteljesen csökken és 280°C körül eléri a szilárd oldatnak megfelelő szintet. A felfűtési görbék-ből kitűnik, hogy a reverzió mértéke csökken az ötvözet Zn tartalmának növekedésével.



53. ábra

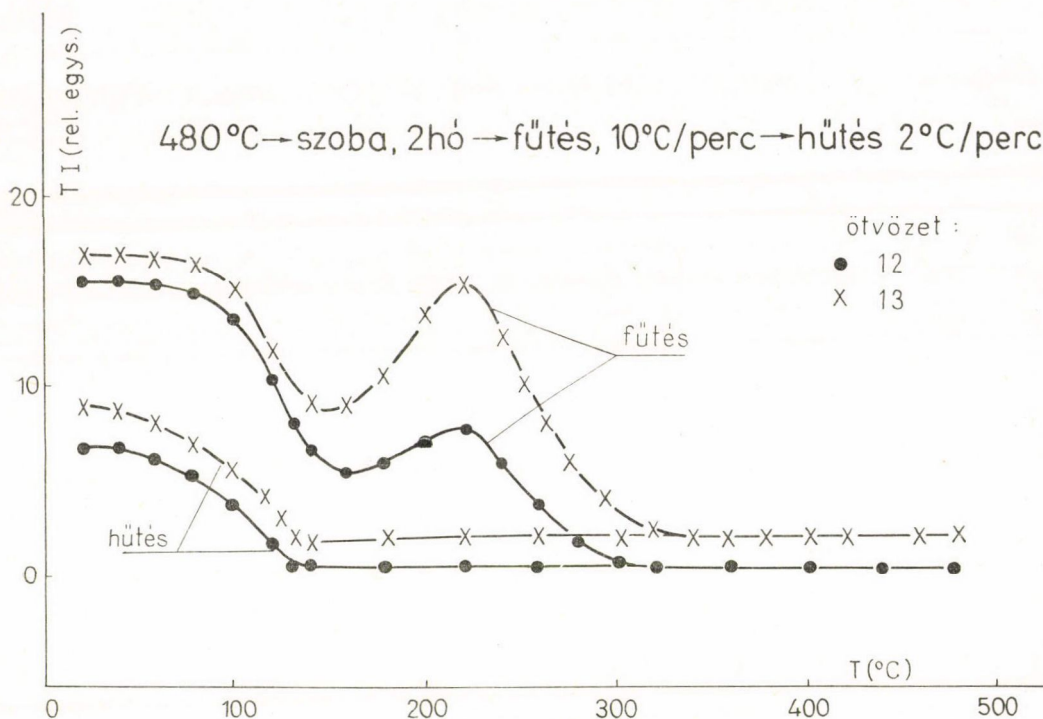


54. ábra

5.3.2. A zónaképződés határhőmérsékletének vizsgálata

Szobahőmérsékletre történő edzést követően különböző hőmérsékletű hőkezeléseket végezve a 8. és 9. ötvözetekben (4.2.1. és 4.2.2. fejezetek) meghatároztuk azt a legmagasabb hőmérsékletet, amely alatt a szilárd oldat szétesése zónaképződéssel megy végbe. Ezt a hőmérsékletet, T_F^{GP} -t, a 8. ötvözetnél 100 °C-nak, a 9. ötvözetnél 80 °C-nak találtuk.

A 3, illetve 4,5 at%Zn tartalmú 10–13. ötvözetekben 480 °C-ról történő, 2 °C/perces folyamatos hűtés mellett mértük a KRSZ teljes intenzitását amit az 54. és 55. ábrán tüntettünk fel. Látható, hogy TI egy jól definiált hőmérsékleten erőteljesen növekedni kezd, a zónaképződés megindulásának megfelelően. Ezt a hőmérsékletet, ahol TI hirtelen növekedése megindul T_F^{GP} -nek tekintjük ezekben az ötvözetekben. Az 54. és 55. ábrán az is látható, hogy TI növekedése a folyamatos hűtés során erőteljesen csökken a Zn tartalom csökkenésével. Ez egyben azt is jelenti, hogy az ennél kisebb (lényegében C_R -nél kisebb) Zn tartalmú ötvözetekben a zónaképződés határát más módon kell meghatározni. Ez nyilván azzal van kapcsolatban, hogy a Zn tartalom csökkenésével csökken a szilárd oldat túltelítettsége és ezért a zónaképződés sebessége jelentősen lecsökken.



55. ábra

Kawano és munkatársai megvizsgálták a szilárd oldat szétesésének folyamatát egy 2,8 at%Zn—1,32 at%Mg összetételű Al—Zn—Mg ötvözetben [60] (3. táblázat, 14. ötvözet). Mechanikai tulajdonságok, KRSZ és TEM vizsgálatok alapján azt találták, hogy a zónaképződés határa ebben az ötvözetben mintegy 115 °C körül van. Érdeemes megjegyezni, hogy méréseik alapján megállapították, hogy 80 °C fölött az η' fázis magképződése is megfigyelhető, jelentős inkubációs idő nélkül. Véleményük szerint a 80—115 °C-os hőmérséklet-tartományban a GP zóna $\rightarrow \eta'$ szilárdfázisú reakció is végbemegy. Ugyanakkor 115 °C fölött az η' fázis kialakulását csak hosszabb inkubációs idő után figyelték meg, GP zónák képződése nélkül. Ezek a megfigyelések teljes összhangban állnak a magasabb hőmérsékletű zónaképződéssel kapcsolatos megállapításainkkal, melyeket a 4.2.1. fejezetben részleteztünk. A Kawano és munkatársai által megfigyelt, inkubáció nélküli η' magképződés véleményünk szerint a GPII típusú zónák képződése. A GPII zónák pedig, amint azt megállapítottuk, nagyobb méretük és az η' fázishoz valószínűleg közelebb álló összetételük következtében képesek átnőni az η' fázis részecskéibe. Ugyanakkor 115 °C körül az η' képződésben hirtelen egy hosszú inkubációs periódus áll be, ami azt jelenti, hogy a GPII zónák képződése ilyen hőmérsékleteken megszűnik és az η' fázis részecskéi más módon, a mátrixból nukleálódnak.

A T_F^{GP} értékeit a megvizsgált esetekre a 4. táblázatban tüntettük fel.

4. TÁBLÁZAT

Ötvözetek	C_{Zn} (at%)	C_{Mg} (at%)	T_R (x) (°C)	T_R (σ) (°C)	T_F GP (°C)	η'_{HH} (°C)	η'_F (°C)
1	2,48	3,3	152	163			
2	2,48	1,11	180	155			
3	1,86	1,67	145	145			
4	1,48	2,78	134	136			
5	1,48	1,21	147	136			
6	1,01	0,61	120	120			
7	1,90	1,11	155	—			
8	2,0	1,11	160	—	100		180
9	1,33	2,4	135	135	80		170
10	4,5	2	—	158	150	180	210
11	4,5	3	—	160	165	195	210
12	3,0	2	—	150	120	180	200
13	3,0	3	—	160	125	185	200
14 (y)	2,8	1,32			115	170	
15 (v)	2,48	2,26					195
16 (z)	2,5	3,2				155	

(x) folyáshatárból kapott értékek

(σ) KRSZ-ból kapott értékek

(y) Kawano és munkatársai [60]

(v) Thackery [37]

(z) Lorimer és Nicholson [43]

5.3.3. A η' átmeneti fázis képződése

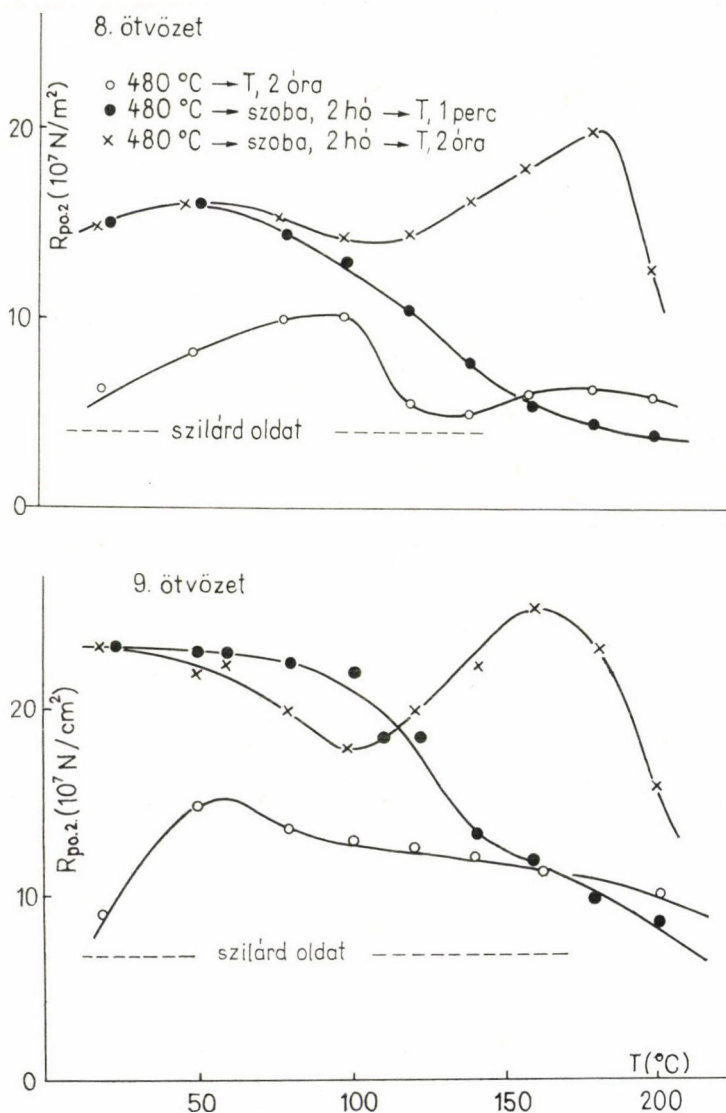
Az ötvözetrendszer kedvező mechanikai tulajdonságait a mátrixszal csak részlegesen koherens, nagy diszperzitású η' átmeneti fázis okozza. Érthető tehát, hogy ennek a fázisnak a nukleációjával és kialakulásával kapcsolatban számos szerző kiterjedt vizsgálatokat végzett már az eddigiekben [43—73, 140—149]. Az η' fázis kialakulásával kapcsolatos egyik legjelentősebb munka *Lorimertől és Nicholsontól* származik [43]. Egy 2,5 at%Zn-et tartalmazó Al—Zn—Mg ötvözetet különböző hőmérsékletekre edzve TEM vizsgálatok alapján azt találták, hogy mintegy 155 °C alatt az η' fázis részecskéi homogénen, ennél magasabb hőmérsékleteken pedig heterogénen nukleálódnak. Az adott hőmérsékleten végzett hosszabb idejű hőkezelések után ennek megfelelően nagy diszperzitású, illetve durva kiválásos szerkezetet kaptak. Lorimer és Nicholson munkája nyomán tehát meg kell különböztetni az η' fázis homogén és heterogén nukleációs lehetőségeit.

Az η' fázis homogén-heterogén képződési határát *Kawano* és munkatársai [60] 170 °C-nak találták egy 2,8 at%Zn-et tartalmazó Al—Zn—Mg ötvözetben.

4,5 at%Zn és 3 at%Mg összetételű Al—Zn—Mg ötvözetet vizsgálva *Löffler* és *munkatársai* ugyanezt a határhőmérsékletet TEM vizsgálatok alapján 190 és 200 °C közöttinek találták [83].

Az η' átmeneti fázis képződési határát ugyancsak számos szerző vizsgálta [3, 16, 37, 61, 75, 83]. Ennek a meghatározását azonban bonyolulttá teszi az a tény, hogy ezeken és ennél nem sokkal magasabb hőmérsékleteken már kialakul a stabil η fázis, sőt a háromalkotós egyensúlyi T fázis is [3, 16, 37, 61].

2,5 at%Zn tartalmú Al—Zn—Mg ötvözetben *Thackery* [37] elektrondiffrakciós módszerekkel mintegy 195 °C-nak találta az η' fázis képződési határát. A 3, illetve 4,5 at%Zn tartalmú 10—13. számú ötvözeteken a teljes intenzitás „in situ” méréséből 200, illetve 210 °C-nak adódott az η' fázis képződési határa (lásd 54—55. ábrát). Ennek megállapításánál figyelembe kell venni, hogy az ennél magasabb hőmérsékleteken kialakuló második fázisok mérete TEM vizsgálatok tanúsága szerint több tíz nm [3, 83], ami nagyobb a jelen vizsgálatoknál alkalmazott röntgen kisszögű



56. ábra

kamra felbontóképességénél. Ez azt jelenti, hogy az 54., 55. ábrán a folyamatos fel-fűtéssel kapott teljes intenzitásgörbéknek a kb. 210 °C körüli maximum utáni csökkenése egyrészt az η' részecskéknak a stabil η típusú részecskékké való átnövésének (és ezzel együtt eldurvulásának), másrészt a kisebb η' típusú részecskék feloldódásának tulajdonítható.

A 2,5 at%Zn-nél kisebb Zn tartalmú ötvözetek esetében az η' fázis képződési határát úgy határoztuk meg, hogy megnéztük a kérdéses ötvözet szilárdságnövekedését hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetést követő, különböző hőmérsékletű, azonos idejű hőkezelések után. A 8. és 9. ötvözetek esetében ezek a vizsgálatok az 56. ábrán láthatók. Az (x)-szel jelölt görbe felel meg az említett hőkezeléseknek.

Mint már említettük, jelentős szilárdságnövelő hatása csak az η' átmeneti fázisnak van (legalábbis a 100 °C-nál magasabb hőmérsékleteken), ezért joggal tekinthetjük az $R_{p0,2}$ maximumához tartozó hőmérsékletet az η' fázis képződési határának. Ez a 8. ötvözet esetében 180, a 9. esetében 170 °C-nak adódik.

5.3.4. A reverzió és az η' fázis képződésének kapcsolata

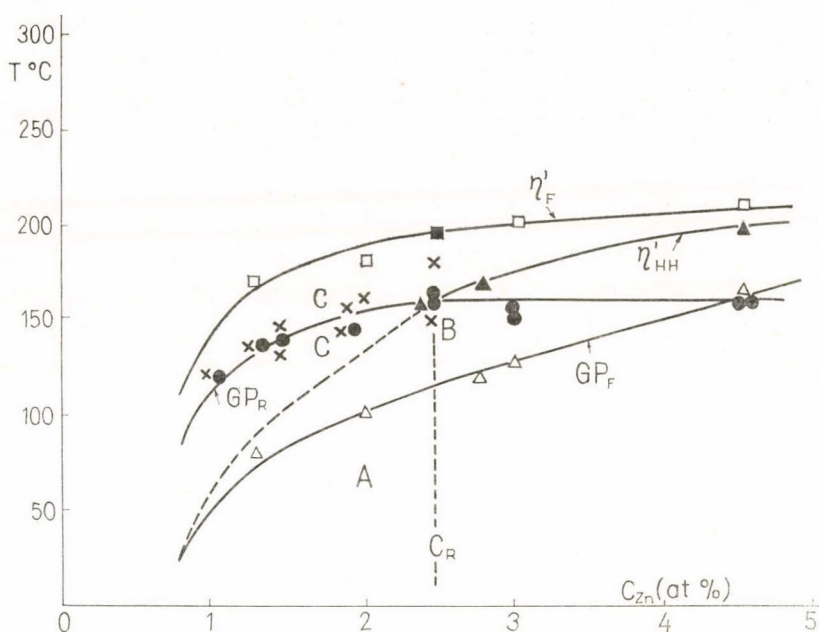
A 4.1. fejezetben megállapítottuk, amint ez a 20. ábrán feltüntetett fázisdiagramon is látható, hogy a szobahőmérsékleti zónák Zn koncentrációja, a vizsgált ötvözetek esetében, az ötvözet összetételétől függetlenül kb. 42 at%. Ugyanakkor számos irodalmi eredmény utal arra, hogy az ötvözetrendszerben lejátszódó szilárd fázisú reakciók hőmérséklet- és időfüggése csak nagyon csekély mértékben változik, ha egy adott Zn tartalom mellett az ötvözet Mg tartalmát mintegy 1 és 3 at% között változtatjuk [3, 41, 42, 63, 65, 128, 146, 151]. Ugyanezt támasztják alá a 10—13. ötvözeteken végzett KRSZ vizsgálataink is (54. és 55. ábrák). Ez azt jelenti, hogy az itt vizsgált ötvözetekben lejátszódó fázisátalakulás szempontjából az ötvözetek Zn tartalmát kell elsődlegesnek tekintenünk.

Mindezeket figyelembe véve az 5.4.1.—5.4.3. pontokban meghatározott határhőmérsékletek alapján szerkesztettünk egy fázisdiagramot a Zn koncentráció függvényében, amely az 57. ábrán látható. (Fontosnak tartjuk itt megjegyezni, hogy az ötvözetek Mg tartalmának az egyes határhőmérsékletekre gyakorolt hatását nem tartjuk elhanyagolhatónak, azonban ennek részletes elemzése további vizsgálatokat igényel, ami túlzvet a jelen dolgozat keretein.)

Az üres háromszögekkel a zónaképződés határát jelöltük. Az ezeken átmenő, GP_F görbét a zónaképződés határának tekintjük, ami azt jelenti, hogy az ezeknél alacsonyabb hőmérsékleteken a szilárd oldat szétesése zónaképződés révén megy végbe. Meg kell jegyezni, hogy vizsgálataink szerint (4.1, 4.2 és 5.3.2.) a szobahőmérsékleten hosszú idő alatt keletkező zónák nagyjából ugyanezen hőmérsékletek fölött válnak instabilakká. Ez tehát egyben a metastabil zónák szolvusz hőmérséklete is.

A hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés során keletkező GP zónák reverziós hőmérsékletét az ábrán ponttal, illetve x-szel jelöltük, aszerint, hogy a KRSZ, vagy a folyáshatár mérése alapján határoztuk meg. A mérési pontokon átmenő görbét, amely a szobahőmérsékleti zónák reverziós hőmérsékletét adja meg, GP_R -rel jelöltük.

Az η' fázis homogén-heterogén nukleációjának a határát a teli háromszögek jelölik és az ezeket összekötő görbét η'_{HH} -nak neveztük.



57. ábra

Az üres, illetve teli négyszögek az η' fázis képződési határát adják meg. Az ezeken átmenő görbét η'_F -fel jelöltük.

A fázisdiagramon látható, hogy a GP_R és az η'_{HH} vonalak átmetszik egymást a 2,5 at%Zn koncentráció értékénél. (Az ábrán szaggatott vonallal jelöltük be az η'_{HH} vonal képzeletbeli folytatását a C_R -nél kisebb Zn koncentrációnál.)

Éppen az a tény, hogy a metastabil fázishatárok átmetszik egymást, nyújt módot arra, hogy az ötvözetrendszer látszólag ellentmondásos reverziós viselkedését meg tudjuk magyarázni az alábbi módon.

A hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés során keletkező GP zónák a GP_R -nél feloldódnak. Vizsgáljuk most először azt az esetet, amikor az ötvözet Zn tartalma kisebb, mint 2,5 at% ($C_{Zn} < C_R$). Ilyenkor az ötvözet túltelítettsége még akkor sem elegendő az η' fázis homogén nukleációjához, ha az összes zóna teljesen feloldódik. Ebben a koncentráció tartományban ugyanis a GP_R vonal az η'_{HH} vonal felett húzódik és egy rögzített Zn koncentráció esetén a GP_R -hez tartozó hőmérsékleten a homogén nukleációhoz szükséges túltelítettség nagyobb, mint ami elérhető az összes zóna feloldódása, tehát a teljes reverzió révén. Ebben a Zn koncentráció tartományban tehát a teljes reverzió megelőzi az η' fázis képződését.

Egészen más a helyzet, ha az ötvözet Zn koncentrációja nagyobb, mint 2,5 at% ($C_{Zn} > C_R$). Egy rögzített Zn koncentráció esetén 160 °C-ig (ez ugyanis itt a GP_R) megnő a mátrix Zn koncentrációja 2,5 at% -ra a GP zónák oldódása révén, de ezen a hőmérsékleten és ennél a mátrix koncentrációnál megindul az η' fázis homogén nukleációja még mielőtt a GP zónák reverziója befejeződött volna. Ebben a koncentráció tartományban tehát a szobahőmérsékleti GP zónák reverziója csak részleges,

A 2,5 at%-nál kevesebb Zn-et tartalmazó ötvözeteknél jól ismert dolog, hogy az η' fázis kialakulását döntő mértékben megnöveli a hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés. A 8. és 9. ötvözetek esetében jól mutatja ezt az 56. ábra, ahol körökkel jelöltük az edzés után 1 perccel a különböző hőmérsékleteken 2 órát hőkezelt minták folyáshatárát. Látható, hogy ezek az értékek messze elmaradnak azokhoz képest, amelyek a hőkezelés előtt 2 hónapos szobahőmérsékleti hevertetésben részesültek.

Az 57. ábra alapján ezt a következő módon értelmezzük. A 8. és 9. ötvözetek 2 és 1,33 at%Zn-et tartalmaznak. Ha az edzést közvetlenül követi egy, pl. 160 °C-os hőkezelés, akkor gyakorlatilag a szilárd oldat állapotú ötvözet kerül abba a tartományba, ahol η' fázis csak heterogén eloszlással nukleálódhat, ennek megfelelően a folyáshatár alig, vagy kevéssé nő. Ha azonban ugyanezt a 160 °C-os hőkezelést hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés előzi meg, akkor a GP zónák teljesen reverálódhatnak ugyan a 160 °C-os hőkezelés legelején (ezt mutatják az 1 perces hőkezelésekhez tartozó pontok az 56. ábrán), mégsem áll elő homogén szilárd oldat a reverzió során, hanem kis koncentráció fluktuációk maradnak a feloldott GP zónák helyén. Ezek a koncentráció fluktuációk teszik lehetővé a homogén eloszlású (nagy diszperzitású) nukleációt az egyébként heterogén nukleáció tartományában.

Az 57. ábra alapján jól értelmezhető a Melander és Persson által az η' fázis nukleációjára adott ún. kétutas modell [75]. Eszerint egy 2 at%Zn és 1,4 at%Mg tartalmú ötvözetben az edzést követő 120 °C-os hőkezelés során először homogén, nagy diszperzitású, majd hosszú idejű hőkezelés után a mátrix kiválásmentes tartományokban heterogén, durva kiválásos szerkezet alakul ki. Az 57. ábra szerint a 2 at%Zn esetén 120 °C-on az ötvözet a zónaképződés határa fölött, ugyanakkor a homogén η' képződés tartományában van. A hőkezelés első szakaszában az η' fázis részecskéinek keletkezése homogén módon megy végbe, mindaddig, amíg a mátrix túltelítettsége le nem csökken a homogén η' képződés határáig. A hőkezelés további részében, a mátrix túltelítettségének lecsökkenése következtében, az η' fázis kialakulása heterogén módon zajlik le durva szerkezetet eredményezve. Teljesen hasonló eredményre jutottak Löffler és munkatársai [152], akik 4,5 at%Zn tartalmú ötvözetet edzetek 180 °C-ra. A hőkezelés kezdeti szakaszán nagy diszperzitású, homogénen, majd később, az üres mátrix területeken durva eloszlású, heterogénen nukleálódott kiválásos szerkezetet kaptak.

A C_R -nél kisebb Zn tartalmú ötvözeteken korábban végzett vizsgálataink [135, 136] teljes összhangban állnak az itt leírt fázisdiagrammal. Akkor azt találtuk, hogy a szobahőmérsékleti zónák teljes mértékben feloldódnak a reverzió során, függetlenül a zónák méretétől. Nincs kizárva természetesen, hogy néhány nagyméretű GP zóna átnő az η' fázis magjaiba, de nézetünk szerint nem ez a döntő folyamat. Az η' fázis nukleációja ebben a koncentráció tartományban úgy megy végbe, hogy a GP zónák helyén megmaradó Zn—Mg koncentráció fluktuációk kedvező helyül szolgálnak az η' magképződés számára. Végeredményben tehát heterogén mechanizmussal (nem homogén szilárd oldatból) nukleálódik az η' fázis a fázisdiagramnak megfelelően, de mivel a mátrixban levő heterogenitások (a GP zónák helyén visszamaradó klaszterek) sűrűn helyezkednek el, a kiválásos szerkezet nagy diszperzitású lesz.

A C_R -nél nagyobb Zn tartalmú ötvözetek esetében a részleges reverzió miatt a GP zóna $\rightarrow \eta'$ szilárdfázisú reakciónak már lényeges szerepe van az η' fázis kialakulásában. Ezen utóbbi reakció konkrét mechanizmusára Marth és munkatársai kidolgoztak egy modellt [71], amellyel magyarázni tudták, hogy milyen módon nő át egy

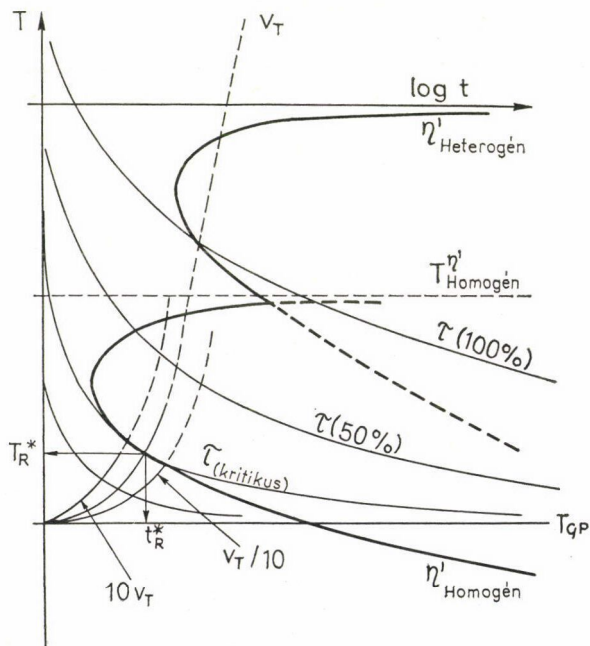
nagyméretű GP zóna az η' fázis magjába. Vizsgálataikat alkalmazták többek között egy 2,5 at%Zn-et tartalmazó Al—Zn—Mg ötvözetre, amely, mint az az 57. ábrán látható, éppen a kritikus összetétel és ennél a GP zóna $\rightarrow \eta'$ reakció már jelentősebb mértékben lejátszódhat.

5.3.5. A reverzió termodinamikai modellje

Az eddigieknek megfelelően abból kell kiindulnunk, hogy az η' fázis részecskéi egyrészt homogénen, másrészt heterogénen nukleálódhatnak. Az egyik esetben nagy diszperzitású, a másik esetben durva szemcsés kiválásos szerkezet alakul ki. A homogén nukleációs tartományban az η' képződés viszonylag rövid inkubációval megy végbe, a heterogén nukleációs tartományban az inkubációs idő jelentős [60, 126, 132]. A homogén nukleáció GP zónákon keresztül, a heterogén nukleáció a mátrixban levő különböző heterogenitásokon megy végbe. Ezek közé tartozhatnak a reverzió során a zónák helyén megmaradó atomcsoportok is. A 4.3. fejezetben megmutattuk, hogy csak a GPII típusú zónák alkalmasak arra, hogy belőlük az η' fázis magjai vagy részecskéi kialakuljanak.

A fentiek alapján sematikusán megrajoltuk a homogén, illetve heterogén η' magképződés inkubációs időtartamainak TTT diagramjait (58. ábra).

Mind az $\eta'_{\text{heterogén}}$, mind az $\eta'_{\text{homogén}}$ annak az állapotnak felel meg, amikor az ötvözet a magasabb hőmérsékletre helyezés előtt szobahőmérsékleten hosszú ideig hevert. Az 50. ábrán η'_{GP} -vel jelölt TTT görbe tehát itt az $\eta'_{\text{heterogén}}$ görbének felel meg.



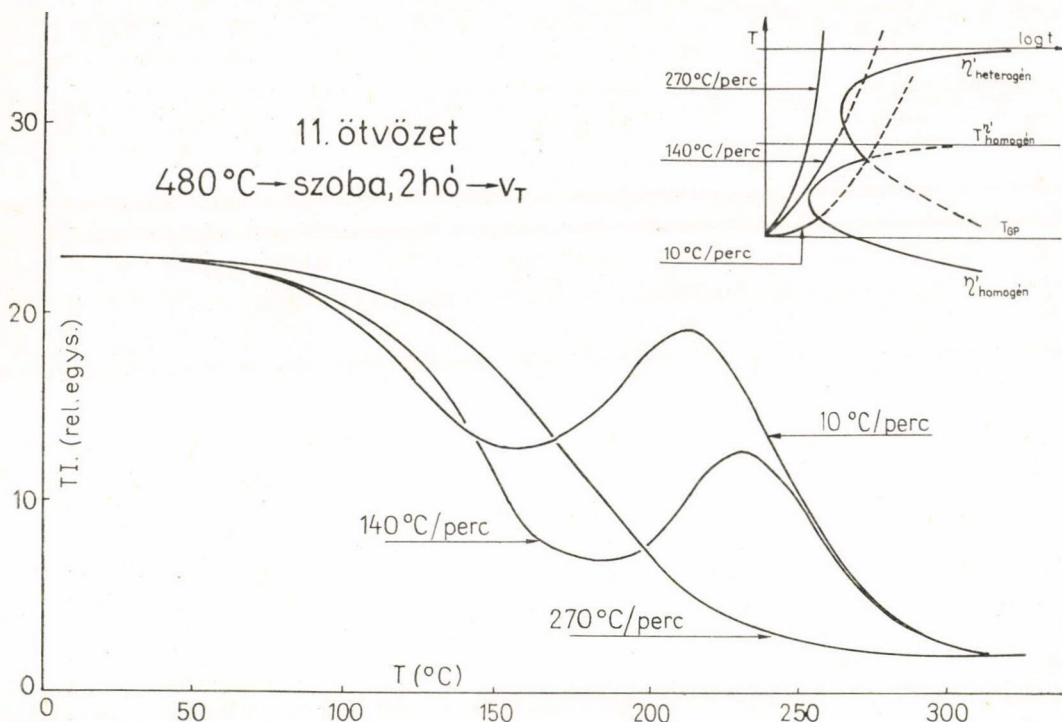
58. ábra

Az 50. ábrán τ -val jelöltük azt a görbét, amely megadja egy adott hőmérsékleten a zónák teljes feloldódását jellemző időállandót. Kézenfekvő bevezetni a szobahőmérsékleti zónák bizonyos hányadának feloldódását jellemző időállandókat is. Ezeket az 58. ábrán sematikusan a τ mellé írt százalékkal jellemeztük. A reverzió során a mintát valamilyen véges, v_T sebességgel fűtjük fel szobahőmérsékletről a magasabb hőmérsékletekre. A $\log(t)$ időléptéknek megfelelően a lineáris fűtést az ábrán v_T -vel jelölt görbe mutatja. Ahol a v_T görbe átmetszi az $\eta'_{\text{homogén}}$ TTT diagramot, megindul az η' homogén képződése a $GP \rightarrow \eta'$ szilárd fázisú reakció szerint. Az ugyanezen metszésponthoz tartozó τ görbe (ezt $\tau(\text{kritikus})$ -val jelöltük) megadja, hogy a szobahőmérsékleti zónák hány százaléka oldódott fel az adott esetben. Az ábrából kitűnik, hogy $\tau(\text{kritikus})$ értéke függ a v_T fűtési sebességtől. Ugyanakkor a logaritmikus időskála miatt ez a sebességfüggés a technikailag elérhető fűtési sebesség tartományokon belül (1–2 °C/perctől néhány 100 °C/perc) nem biztos, hogy jelentős. Az 52. ábrán látható DSC—2 felfűtésekből kapott oldáshők pl. azonosaknak adódtak 20, 40 és 80 °C/perces fűtési sebességekkel. A v_T és az $\eta'_{\text{homogén}}$ görbék metszéspontja megadja a T_R reverziós hőmérsékletet és a hozzá tartozó t_R reverziós időtartamot. Az előbb mondottak értelmében ezekhez a paraméterekhez hozzá kell tenni, hogy milyen fűtési sebesség mellett kaptuk őket.

Az alacsonyan ötvözött minták esetében, az 57. ábrának megfelelően, a T_{GP} hőmérséklet lényegesen közelebb kerül a $T_{\text{homogén}}$ hőmérséklethez. Az 58. ábrán nyommon követhető, hogy lesz egy olyan helyzet, adott v_T mellett, hogy a v_T görbe már éppen nem érinti az $\eta'_{\text{homogén}}$ görbét. Ilyenkor homogén η' képződés nélkül a v_T -vel, vagy annál nagyobb sebességgel felfűtött mintákban lehetséges a teljes reverzió. Az ábrából az is látható, hogy ilyen esetben éppen a részleges reverzió megvalósítása a bonyolultabb feladat, amit folyamatos felfűtéssel, a szükséges extrém kis fűtési sebességek miatt, nem könnyű megvalósítani. Izoterm hőkezelésekre van szükség, ami az 58. ábra szerint a kívánt hőmérsékletre történő gyors felfűtést és hőntartást jelent. Ezt tettük az 1,33, illetve 2 at% Zn-et tartalmazó 8. és 9. ötvözetek esetében, melyek közül a 9. ötvözetre vonatkozó eredményeket az 5.1. pontban részletesen ismertettünk.

A reverziónak a v_T fűtési sebességtől való függését jól mutatja az 59. ábra. A 4,5 at%Zn és 3 at%Mg tartalmú 11. mintát 2 hónapos szobahőmérsékleti hevertetés után különböző fűtési sebességekkel felfűtöttük a Kiessig típusú KRSZ kamrában. A TI, teljes szórt intenzitás változása a felfűtések során az ábrán látható. Megfigyelhető, hogy a reverzió mértéke ugrásszerűen megnő a 140 °C/perces fűtés esetén a 10 °C/perces fűtéshez képest, bár még 140 °C/perc mellett sem teljes. 270 °C/perces fűtéssel a reverzió már teljes, ugyanakkor már η' képződés sem figyelhető meg. (A gyors fűtéseknel a „rate meter” időállandóját 0,5 sec-nak választottuk.) Az 58. ábrának megfelelő TTT diagramokat is feltüntettük az ábrán. Modellünk szerint, ha $v_T = 10$ °C/perc, homogén η' képződés indul meg, viszonylag csekély reverzió után. A $v_T = 140$ °C/perc fűtésnél a fűtési görbe elkerüli az $\eta'_{\text{homogén}}$ TTT diagramot és nagyobb mértékű reverzió, valamint magasabb hőmérsékleten lezajló η' képződés figyelhető meg. A 270 °C/perces fűtés teljesen elkerüli az $\eta'_{\text{heterogén}}$ görbét is, így a zónák teljesen feloldódnak η' képződés nélkül.

Az 5.3.2. pontban elmondtuk, hogy Kawano és munkatársai [60] egy 2,8 at%Zn és 1,32 at%Mg összetételű Al—Zn—Mg ötvözetben a 80 és 115 °C-os tartományban az η' képződést zónaképződésen keresztül észlelték. Ugyanilyen viselkedést tapasztaltunk mi is a 8. ötvözetnél mintegy 70 és 110 °C között, valamint a 9. ötvözetnél



59. ábra

mintegy 80 és 100 °C között (4. és 5. fejezetek). A GP zónákon keresztül történő η' nukleáció és képződés a homogén η' képződésnek felel meg. A heterogén η' képződést nem előzi meg zónaképződés. Ezt a két nukleációs mechanizmust különböztettük meg az 58. ábrán is. A szobahőmérsékleti zónák reverziója során a homogén η' képződés tehát a következő szilárfázisú reakció szerint megy végbe:



A 2,5 at%-nál kisebb Zn tartalmú ötvözetekben ez a reakció elhanyagolható az η' képződés szempontjából.

A zónaképződést és az η' fázis kialakulását, valamint a reverzió jelenségét a következő módon foglalhatjuk össze az 57. ábrán látható fázisdiagram alapján.

Az oldó hőkezelést követő edzés után a GP_F határ alatt a szilárd oldat szétesése zónaképződéssel megy végbe („A” tartomány). A „B”-vel jelölt tartományban az η' fázis homogén módon, nagy diszperzitású eloszálással GP zónákon keresztül képződik a szilárd oldatból.

A „C” tartományban az η' fázis nukleációja heterogén módon, kristályhibákon, diszlokációkon, szemcsehatárokon vagy szennyező atomcsoportokon játszódik le.

Az edzést követő, hosszú idejű szobahőmérsékleti hevertetés során kialakuló GP zónák a minta felfűtése során feloldódnak, azaz reverztálódnak. A 2,5 at% Zn tartalom azonban határkoncentrációt jelent a reverzió szempontjából. Az ennél ke-

vesebb Zn-et tartalmazó ötvözetben a reverzió teljes, a GP zónák teljesen feloldódnak az η' fázis képződését megelőzően. A 2,5 at%-nál nagyobb Zn tartalmú ötvözetekben az η' fázis kialakulása (az elérhető fűtési sebességek mellett) már a GP zónák feloldódása közben jelentős mértékben előrehalad a $\text{GPI} \rightarrow \text{GPII} \rightarrow \eta'$ szilárd fázisú reakció révén.

6. A mechanikai tulajdonságok értelmezése a GP zónák és az η' kiválások szerkezeti paramétereire alapján

A közepes szilárdságú Al—Zn—Mg típusú ötvözetek folyáshatára $30\text{--}40 \times 10^7 \text{ Nm}^{-2}$ körüli értékeket érhet el megfelelő nemesítő hőkezelések alkalmazásával. Eközben szakítószilárdságuk $40\text{--}50 \times 10^7 \text{ Nm}^{-2}$ -re növekszik. Az alakíthatóságuk a folyáshatár növelésével általában erőteljesen csökken. Az elérhető folyáshatár nagyjából arányosan növekszik az ötvözet Zn tartalmával. Ugyanakkor az alakíthatóság, ami a felhasználhatóság szempontjából döntő paraméter, 2 at% Zn tartalom fölött olyan mértékben lecsökken, ami a felhasználást bizonyos területeken lehetetlenné teszi.

Az alumínium ötvözetek jellegzetes szilárdságnövelő mechanizmusa a kiválások keményedés [17, 155—156]. Bár az ilyen típusú szilárdságnövelés ipari alkalmazása már a 30-as években megtörtént [18], a jelenséggel kapcsolatos fizikai törvényszerűségek feltárása ma is az ötvözetkutatás homlokterében álló feladat.

A kiválások keményedéssel kapcsolatban két alapvető kérdés elméleti vizsgálata merül fel. Az egyik a képlékeny alakváltozás megindításához szükséges feszültség, azaz a folyáshatár vizsgálata. A másik az alakítási keményedés folyamatának megértése. A jelen dolgozatban csak az első kérdéssel foglalkozunk, mivel a második fázisú részecskék szerkezeti paramétereire (méret, térfogati hányad, diszperzitás) csak a képlékeny alakváltozás megindításához, vagyis a diszlokáció mozgás megindításához szükséges feszültséget határozzák meg egyértelműen. Az alakítási keményedésben a második fázisú részecskék és diszlokációk közötti kölcsönhatáson kívül lényeges szerepe van a diszlokáció sokszorozódásnak, valamint a diszlokációk közötti kölcsönhatásnak. Ennek a kérdésnek a vizsgálata túlmegy a jelen dolgozat keretein.

A kiválások keményedő ötvözetekben a folyáshatár megértése szempontjából két alapvető különböző típusú részecskét kell figyelembe vennünk. Az egyik esetben a részecskék inkoherensek a mátrixhoz képest és általában lényegesen keményebbek a mátrixnál. Az ilyen részecske előtt megtorpanó diszlokáció, részben a részecske inkoherens fázishatára, részben pedig megnövekedett nyírási modulusza miatt nem tudja azt átvágni. A diszlokáció a külső feszültség hatására erősen kihajlik, majd egy Orowan hurkot hátrahagyva továbbmozog. A másik esetben a részecskék teljesen vagy részben koherensen illeszkednek a mátrixhoz és a részecskén belüli modulusznövekedés sem túlságosan nagy a mátrixhoz képest. Ebben az esetben a diszlokáció által a részecskére ható erő már kis kihajlások esetén elegendően nagy lesz a részecske átvágásához és a diszlokáció mozgásához.

Az átvágásos mechanizmus esetében a K erősségű részecskéktől származó folyáshatár növekedést a következő kifejezés adja meg [157—160]:

$$\tau_c = \frac{K^{3/2}}{2^{1/2} E^{1/2} D b}, \quad (39)$$

ahol E a diszlokáció vonal menti feszültsége, D a részecskék átlagos távolsága és b a Burgers-vektor abszolút értéke.

A részecske erőssége jellemezhető az átvágáshoz szükséges fajlagos felületi energiával, Γ -val is. Tegyük fel ugyanis, hogy a K erő dx távolsággal továbbmozdítja a diszlokációt, akkor a diszlokáció maximálisan a részecske dx $R\pi/2$ nagyságú területét metszi át. $R\pi/2$ a gömb alakúnak feltételezett részecske és a csúszósík metszetének átlagos átmérője. A K erő által végzett munka egyenlő $\Gamma dx \cdot R\pi/2$ -vel és így:

$$K = \Gamma R \frac{\pi}{2}. \quad (40)$$

Ha a részecskék közötti átlagos távolság $D \gg 2R$, akkor a kiválások térfogati hányada a következőképpen írható:

$$f = \frac{R^2 \pi^3}{16D^2} \cong 2 \left(\frac{R}{D} \right)^2. \quad (41)$$

Alkalmazva a szokásos $E = Gb^2/2$ közelítést [158], ahol G a nyírási modulusz, az átvágható kiválások által okozott folyáshatár növekedésre a következő eredményt kapjuk:

$$\tau_c = 1,44G \left(\frac{\Gamma}{Gb} \right)^{3/2} \left(\frac{fR}{b} \right)^{1/2}. \quad (42)$$

A folyáshatár fenti kifejezése egykristályra vonatkozik. Polikristályos próbatetek esetén a mérhető folyáshatár növekedés és τ_c között a Taylor faktor teremt kapcsolatot, amely fcc fémek esetén jó közelítéssel 3 [75, 153]. Így:

$$\Delta R_{p0,2} \cong 3\tau_c. \quad (43)$$

Az Orowan mechanizmus esetében a folyáshatár növekedést az alábbi kifejezés adja meg [161–163]:

$$\tau_c = 0,82 \frac{Gb}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{f}}{R \left(1 - \frac{\pi}{2} \sqrt{f/2} \right)}. \quad (44)$$

Polikristályos próbatetek esetén a mért folyáshatár növekedést itt is a Taylor faktor figyelembevételével ((43) kifejezés) hasonlíthatjuk össze a kiválások szerkezeti tulajdonságaival.

6.1. A folyáshatár vizsgálata a második fázisú részecskék szerkezeti tulajdonságai alapján

A (42) és (44) egyenletekből látható, hogy mind az átvágásos, mind az Orowan mechanizmussal megnövelt folyáshatár a részecskék átlagos mértének és térfogati hányadának a függvénye. Mindkét szerkezeti paraméter, mint ezt az előző fejezetekben láttuk, meghatározható a kisszögű röntgen szórás módszerével, így lehetőség van a mechanikai tulajdonságok elméleti összefüggéseinek kísérleti ellenőrzésére.

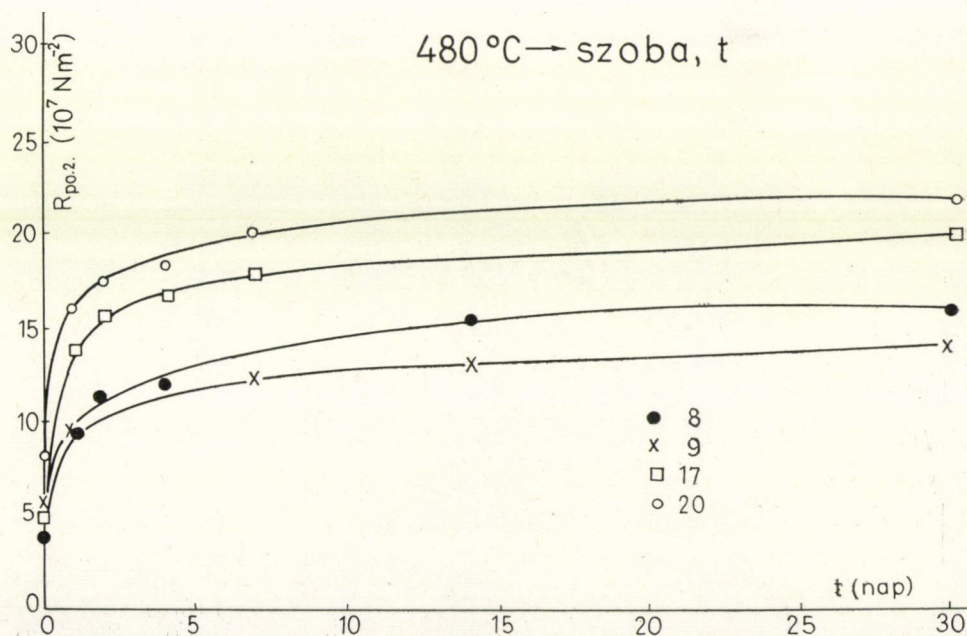
A (42) és (44) kifejezések azt mutatják, hogy míg az átvágásos mechanizmusnál a τ_c/\sqrt{f} mennyiség a részecskeméret növekedésével monoton növekszik, addig az Orowan mechanizmus esetén ugyanez a mennyiség az átlagos részecskeméret reciprokával arányos (kisebb korrekcióktól eltekintve). Ezért a mechanikai tulajdonságok elemzését azzal kezdjük, hogy megvizsgáljuk a $1/\sqrt{f}$ -vel normált folyáshatár növekedés részecskemérettől való függését.

Vizsgálatainkat a 8. és 9. ötvözeteken (1. táblázat), valamint a 8. ötvözet Fe, Si, Zr és Cr adalékokat tartalmazó változatain végeztük el. Az adalékokat tartalmazó ötvözetek összetételét az 5. táblázatban tüntettük fel.

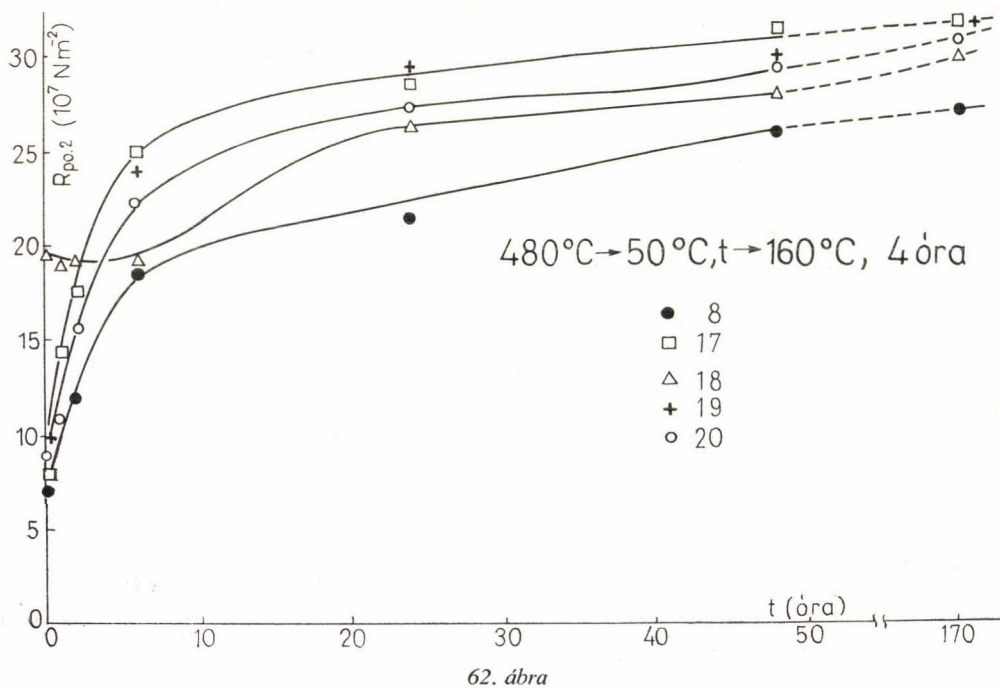
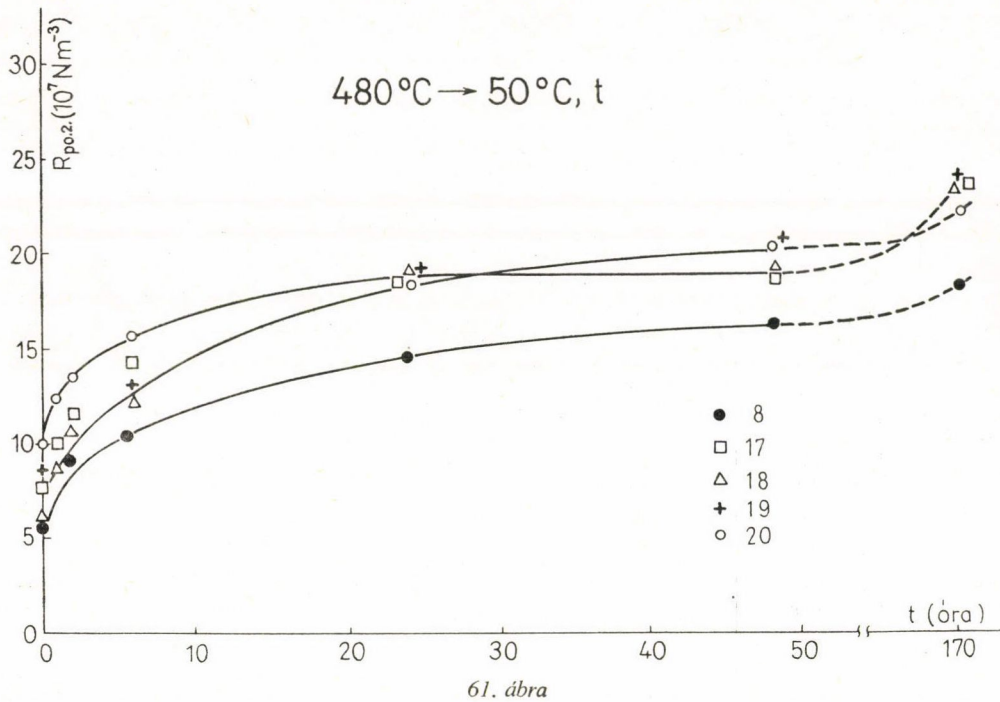
A vizsgált ötvözeteket három különböző hőkezelésnek vetettük alá. Az első esetben az oldó hőkezelés után szobahőmérsékletre történő edzés után vizsgáltuk

5. TÁBLÁZAT

Ötvözet	Zn at %	Mg at %	Fe at %	Si at %	Zr at %	Cr at %
17	1,95	1,11	0,10	—	—	—
18	1,95	1,11	—	0,15	—	—
19	1,95	1,11	—	—	0,025	—
20	1,95	1,11	—	—	—	0,11



60. ábra



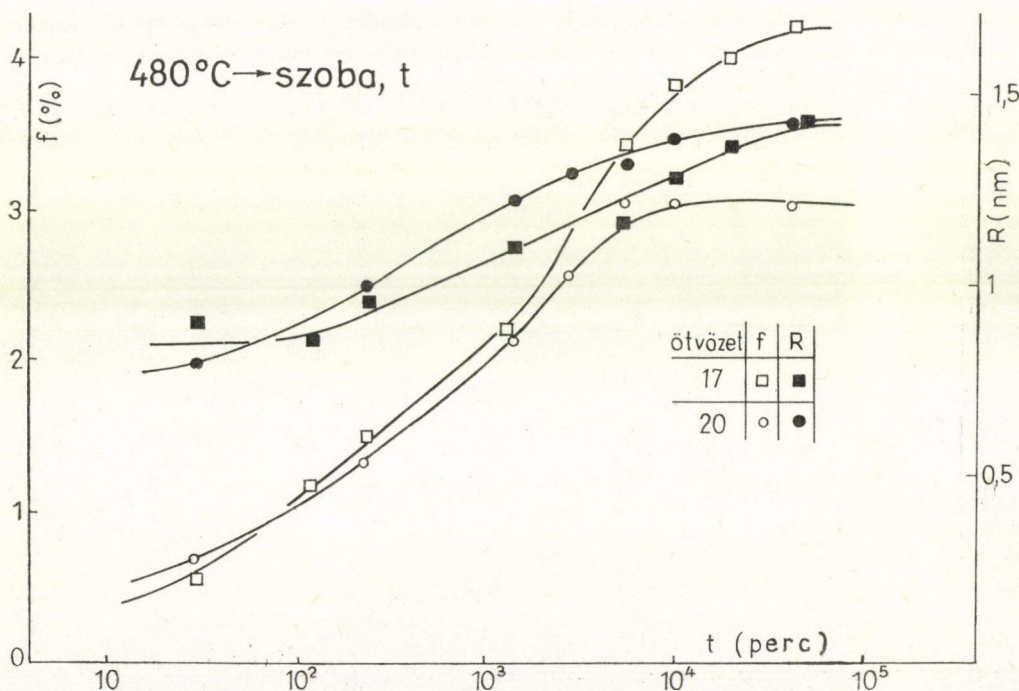
$R_{p0,2}$, R és f változását a szobahőmérsékleti hevertetés során. (A továbbiakban R -rel jelöljük a részecskék átlagos sugarát, amely az R_G Guinier sugárból az

$$R = 1,3R_G \quad (50)$$

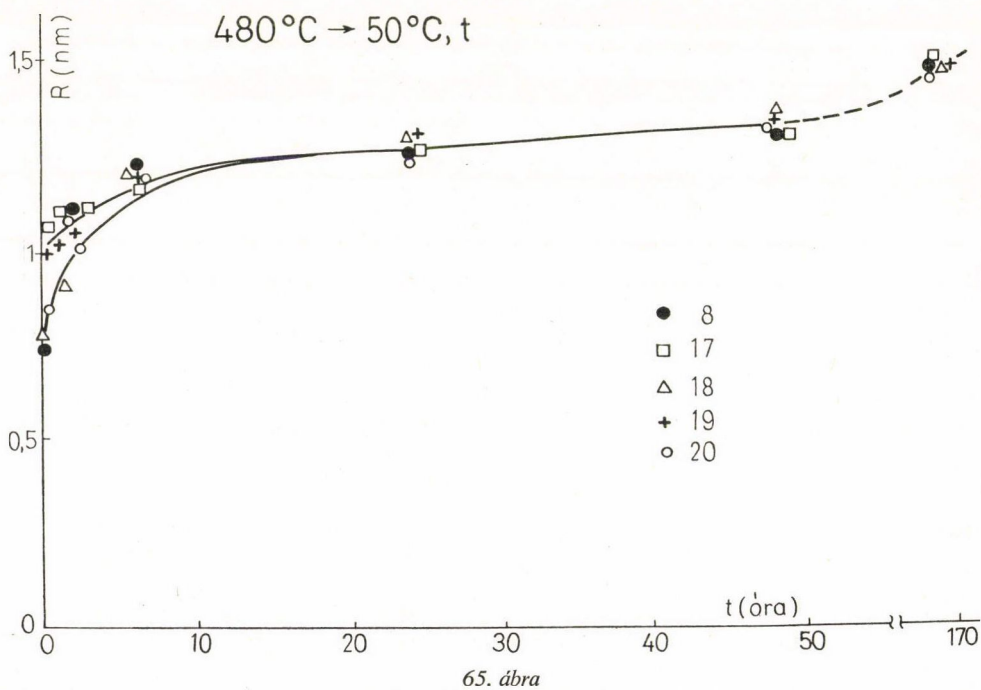
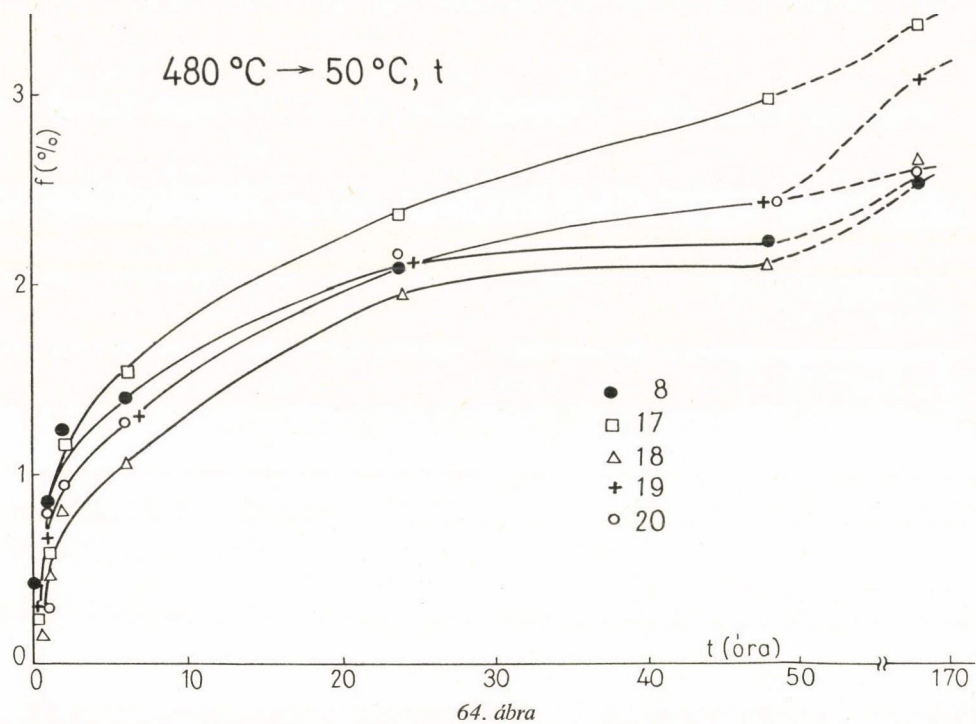
képletből adódik [90].)

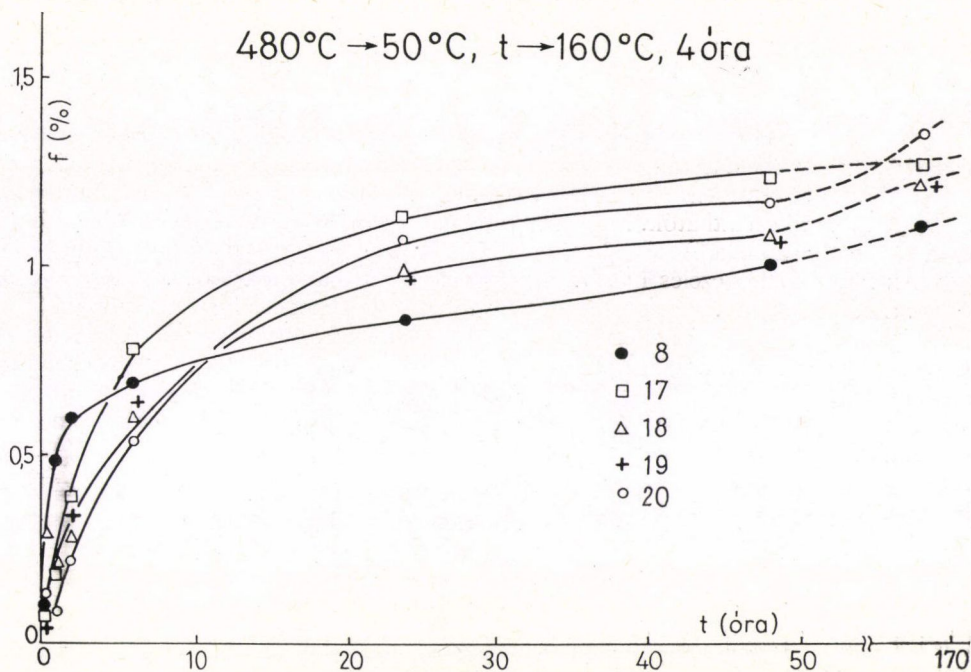
A második esetben az oldó hőkezelt mintákat 50 °C-os vízbe edzettük és 50 °C-on 1 hetes hőkezelés közben vizsgáltuk $R_{p0,2}$, R és f változását. Végül a harmadik esetben az 50 °C-on különböző ideig hőkezelt mintákat 160 °C-on 4 órás hőkezelésnek vetettük alá. Ezen három különböző típusú hőkezeléssel két különböző, GP zónákra, illetve egy, az η' fázisra nemesített állapotban vizsgáltuk a folyáshatár növekedés mechanizmusát.

$R_{p0,2}$ változását a szobahőmérsékleti, illetve az 50 °C-os hőkezelési idő függvényében a különböző ötvözetekre a 60—62. ábrák mutatják. A 60. ábrán látható, hogy a természetes öregítés során keletkező GP zónák jelentős szilárdságnövelést okoznak. Az adalékok kedvező hatása is szembetűnő az ábrából. Az 50 °C-os hőkezelés hatását $R_{p0,2}$ -re a 61. ábra mutatja. Mint azt a 4.2.1. fejezetben láttuk, 50 °C-on GPI (szobahőmérsékleten keletkezővel azonos típusú) zónák képződnek. Az adalékok hatása 50 °C-on is szembetűnő, bár az egyes adalékok hatása nagyon hasonló. A különböző idejű 50 °C-os hőkezelést követő 160 °C 4 órás hőkezelés hatását $R_{p0,2}$ -re a 62. ábrán tüntettük fel. Az adalékok kedvező hatása most is megmutatkozik, sőt itt az egyes adalékok hatása nem teljesen azonos. Látható, hogy a Fe és Zr tartalmú ötvözetek érik el a legmagasabb folyáshatárt, $32 \times 10^7 \text{ Nm}^{-2}$ -t. Szembetűnően eltér

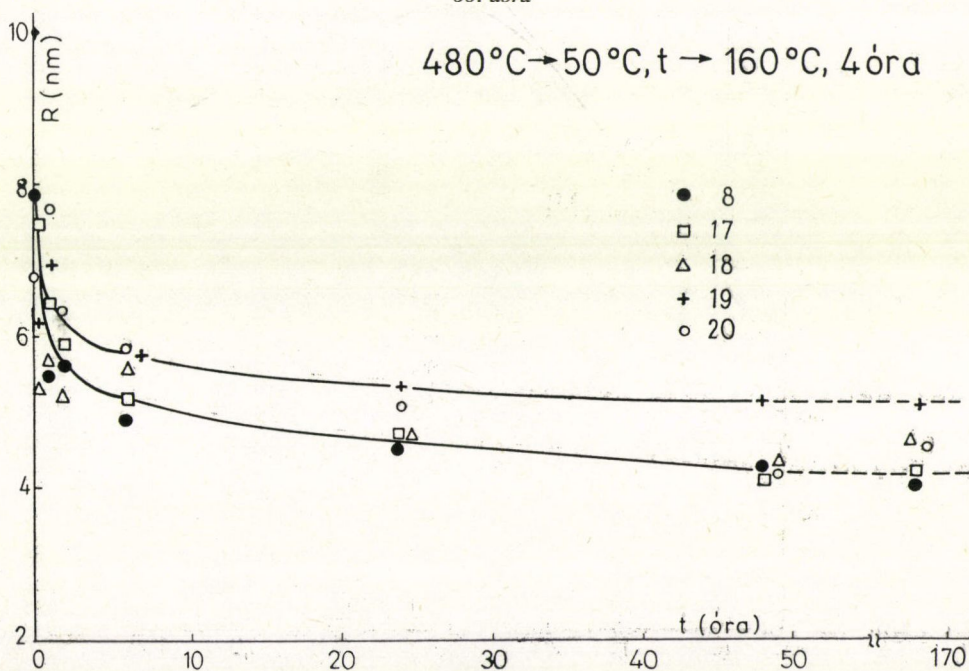


63. ábra





66. ábra



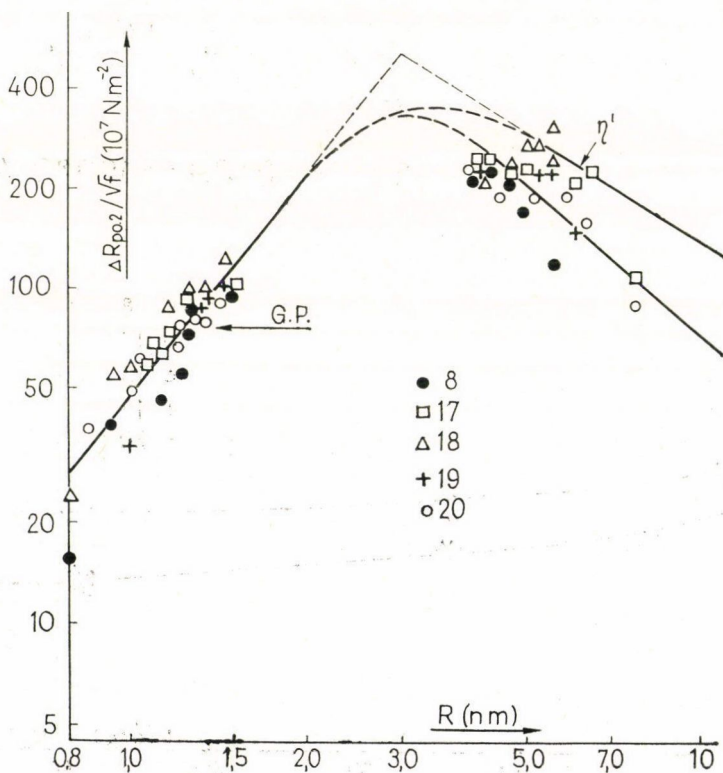
67. ábra

a Si-ot tartalmazó ötvözet a többtől. Rövid idejű 50 °C-os hőkezelést követő 160 °C 4 órás hőkezelés után $R_{p0,2}$ értéke nem csökken $19 \times 10^7 \text{ Nm}^{-2}$ alá, ami nyilván az Mg_2Si kiválások képződésének tulajdonítható [82].

A szobahőmérsékleti hevertetés során kialakuló zónák átlagos méretét és térfogati hányadát a 63. ábrán tüntettük fel a hevertetési idő függvényében a Fe és Cr tartalmú 17. és 20. ötvözetek esetében. A 8. és 9. ötvözetek megfelelő f és R értékei a 10. és 13. ábrákon láthatók. Mind f , mind R monoton növekszik a hevertetési idővel és látható, hogy a Fe kedvezően hat f növekedésére.

Az 50 °C-os hőkezelés hatását a zónák térfogati hányadára és méretére a 64. és 65. ábrák mutatják. Megintcsak f és R monoton növekedése figyelhető meg a hőkezelés idejével. Látható a Fe adalék kedvező hatása f növekedésére (17. ötvözet). Ugyanakkor a Si hatására (18. ötvözet) f az adalékmentes ötvözethez tartozó értékek alatt marad.

Az 50 °C-os hőkezelést követő 160 °C 4 órás hőkezelés hatását f és R -re a 66. és 67. ábrák mutatják. Ismét megfigyelhető a Fe kedvező hatása a kialakuló η' fázis térfogati hányadára. Ugyanakkor a Si-ot tartalmazó ötvözetben is magasabb f értékek alakulnak ki, mint az adalékmentes alapötvözetben.

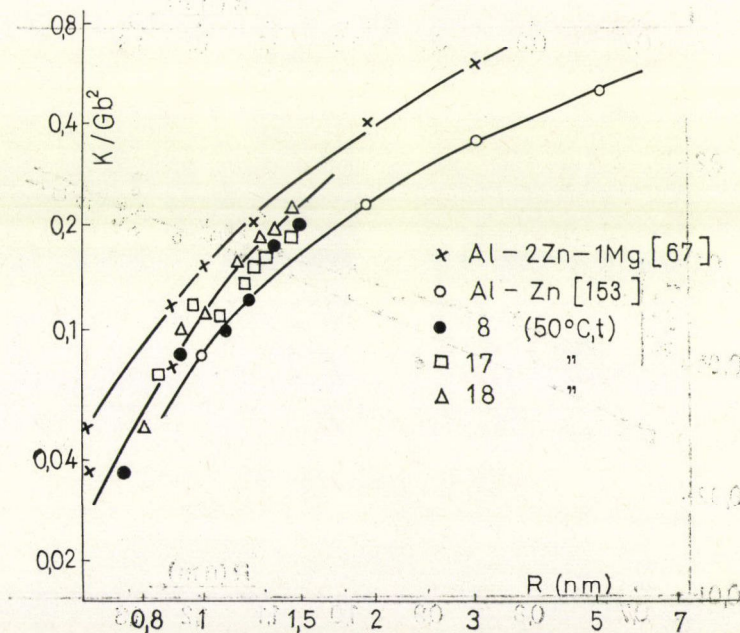


68. ábra

A 67. ábrán az átlagos részecskeméret monoton csökkenése figyelhető meg az 50 °C-os hőkezelés idejének előrehaladásával. Ez annak tulajdonítható, hogy a kialakuló GP zónák stabilitása jelentősen megnő az 50 °C-os hőkezelés során, így az ezt követő 160 °C 4 órás hőkezelés hatására kialakuló η' fázis részecskéinek diszperzitása monoton növekszik és ezzel együtt az átlagos részecskeméret monoton csökken az 50 °C-os hőkezelés időtartamával. Számos bizonyíték van arra, hogy a vizsgált ötvözet típuson alkalmazott 160 °C 4 órás hőkezelés hatására az η' átmeneti fázis részecskéi alakulnak ki [16]. A 67. ábra ezek alapján azt mutatja, hogy az alkalmazott hőkezeléssel 4 és 8 nm közötti átlagméretű η' típusú részecskéket sikerült előállítani.

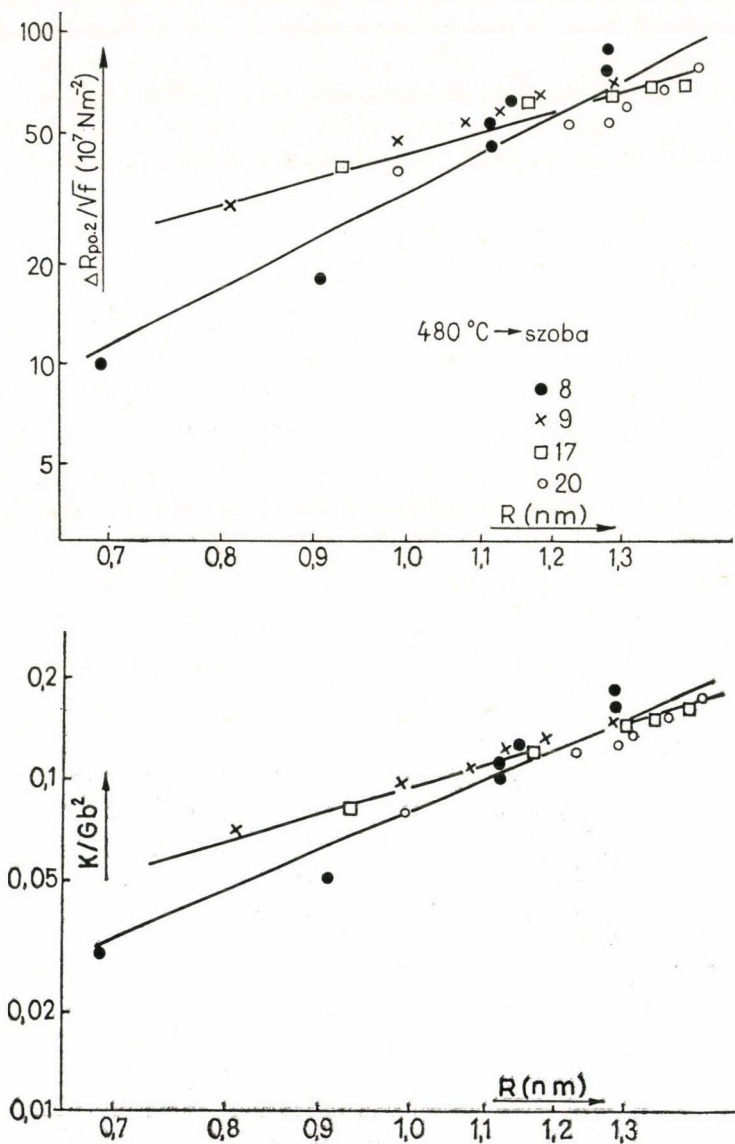
A szilárdságnövelő mechanizmus eldöntése érdekében a fent leírt kísérleti eredmények alapján meghatároztuk a $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$ mennyiségeket és azokat log-log léptékben ábrázoltuk az átlagos részecskeméret függvényében (68. ábra). Jól látható, hogy $R \lesssim 3$ nm értékig $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$ monoton növekszik R -rel, az $R \gtrsim 3$ nm értékeknél pedig monoton csökken R növekedésével. Az első esetben a második fázisú részecskék GP zónák (ezek az 50 °C-os öregítéssel nyert értékek), a második esetben a szilárdságnövekedést az 50 °C-os öregítést követő 160 °C 4 órás hőkezelésnél keletkező η' fázisú részecskék okozzák. A (42) és a (44) egyenleteket figyelembe véve nyilvánvaló, hogy a GP zónák esetében az átvágásos mechanizmus, az η' típusú kiválások esetében viszont az Orowan mechanizmus működik.

Az átvágásos mechanizmus esetében a (39) kifejezés alapján meghatározhatjuk a részecskék erősségét. Ha K helyett a K/Gb^2 anyagtól független mennyiséget határozzuk meg, akkor a különböző ötvözetekben keletkező különböző átvágható részecskék erősségét összehasonlíthatjuk [153]. Gerold [153], valamint Dünkeloh, Kralik



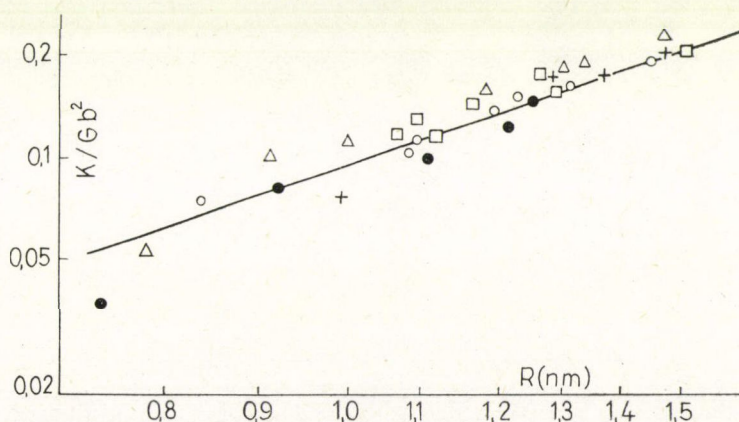
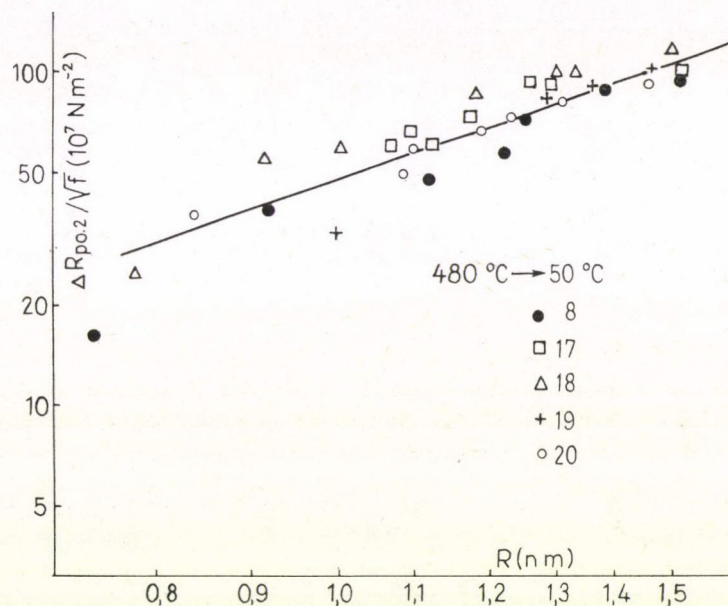
69. ábra

és Gerold [67] Al—Zn, valamint Al—Zn—Mg ötvözeteken végzett vizsgálatainak eredményeit összehasonlítottuk a 8., 17. és 18. ötvözeteken az 50 °C-os öregítéssel nyert K/Gb^2 adatokkal. A 69. ábra mutatja, hogy jó egyezés van az általunk mért mennyiségek és az említett szerzők eredményei között annak ellenére, hogy eredményeik egykristály vizsgálatokból származnak.



70. ábra

A 70. és 71. ábrák $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$ és K/Gb^2 változását mutatják a részecskeméret függvényében a szobahőmérsékleten, illetve 50 °C-on keletkező zónák esetében. A log-log ábrákon látható, hogy a részecskemérettől való függés a mérési hibákon belül viszonylag jól leírható egy-egy hatványfüggvénnyel. A szobahőmérsékleti zónák esetében a 8. ötvözetre K/Gb^2 méretfüggésében a hatványkitevő 2, a 9, 17 és 20. ötvözetekre 1,7. A (39) egyenletben figyelembe véve az $E = \frac{1}{2} Gb^2$ közelítést és Al-ra behelyette-



71. ábra

síthe b és G értékeit ($b=0,28 \times 10^{-9}$ m, $G=2,700 \times 10^{10}$ Nm $^{-2}$), K/Gb^2 -re a következő adódik:

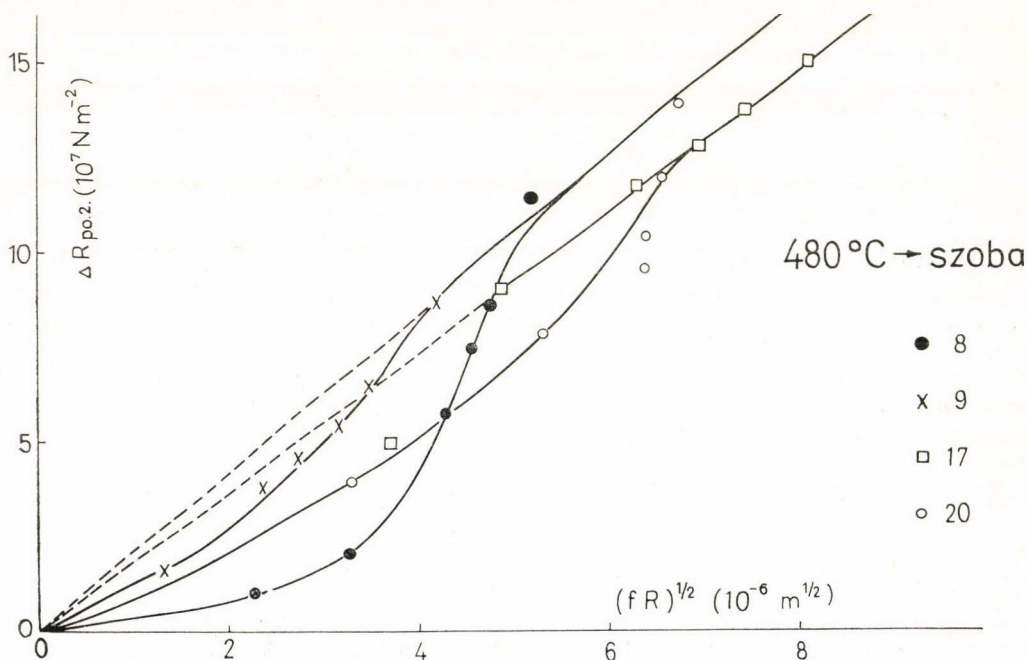
$$K/Gb^2 = 0,157 \left(\frac{R \Delta R_{p0,2}}{\sqrt{f}} \right)^{2/3}. \quad (45)$$

Ebből látható, hogy ha K/Gb^2 R -nek valamilyen hatványfüggvényével leírható, akkor $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$ -nek szintén R valamilyen hatványával kell változnia. A két kitevő közötti kapcsolat (45)-ből leolvashatóan $m = (3/2)n - 1$. A K/Gb^2 méretfüggéséből kapott 2, illetve 1,7 kitevőknek a $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$ esetében $m=2$, illetve $m \approx 1,55$ felel meg.

Az átvágásos mechanizmussal növelt folyáshatárt a (42) egyenletben a részecskék átvágásához szükséges Γ fajlagos felületi energiával adtuk meg. Ugyanebben a kifejezésben a folyáshatár explicit részecskeméret függése $R^{1/2}$. A $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$, illetve a K/Gb^2 mennyiségek R függésének fenti elemzése azt mutatja, hogy Γ nem független a részecskemérettől, sőt a részecskeméretnek monoton növekvő függvénye.

Mivel Γ , a fajlagos felületi átvágási munka, definíciója szerint a részecskéken belüli atomi kötések erősségével kapcsolatos, eredményeink azt mutatják, hogy az adalékmentes ötvözetben a zónaképződés kezdeti szakaszában a zónákon belüli atomi kötések gyengébbek, mint az adalékokat tartalmazó ötvözetekben, illetve a magasabb Mg tartalmú 9. ötvözetben. Ez annak tulajdonítható, hogy az adalékok a zónaképződés nukleációs szakaszában beépülnek a zónákba, illetve részt vesznek a zónák nukleációjában mint magképző helyek.

A $\Delta R_{p0,2}/\sqrt{f}$, illetve K/Gb^2 R függését az 50 °C-os hőkezelés során a 71. ábra



72. ábra

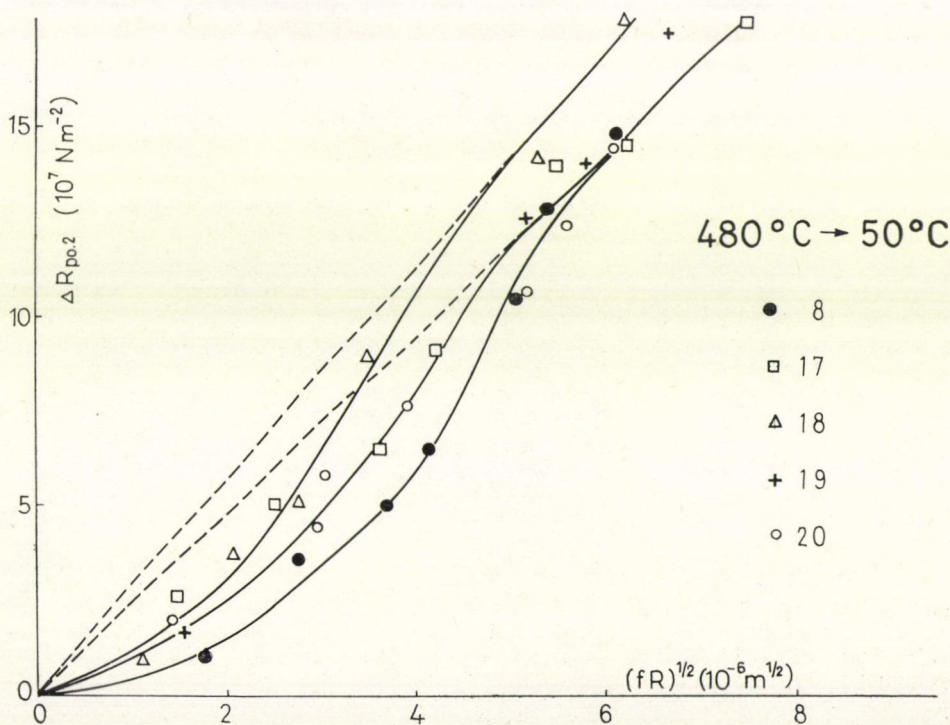
mutatja. Látható, hogy ezen a hőmérsékleten már nincs jelentős különbség az R függés tekintetében a tiszta és az adalékokat tartalmazó ötvözetek között. A megfelelő hatványkitevők a szobahőmérsékleti hevertetésnél tapasztalt kitevők közelébe esnek.

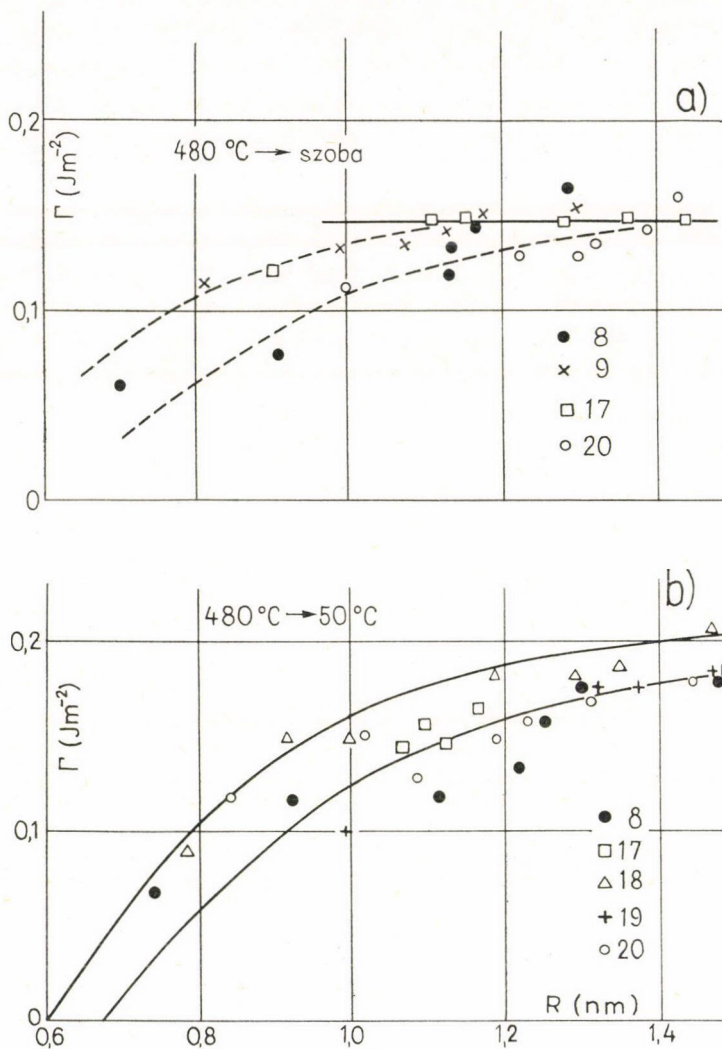
A részecskék átvágásához szükséges fajlagos felületi munkát a (45) egyenletnek megfelelően a folyáshatár növekedés $(fR)^{1/2}$ szerinti ábrázolása alapján vizsgálhatjuk. A szobahőmérsékleti hevertetés esetén ez az ábrázolás a 72. ábrán látható. Az ábrából kitűnik, hogy a zónaképződés kezdeti szakaszán Γ (ami az origóból egy-egy mérési ponthoz húzott egyenes meredekségével arányos) viszonylag alacsony értékeket vesz fel és csak hosszabb hevertetés után éri el a feltüntetett egyeneseknek megfelelő telítési értékeket. Hasonló viselkedés figyelhető meg az 50°C -os hőkezelés hatására, amit a 73. ábra mutat.

A (40) és (45) egyenletek alapján Γ a következő kifejezésből számítható ki:

$$\Gamma = 1,348 \times 10^{-9} \frac{K}{Gb^2} \frac{1}{R} (Jm^{-2}). \quad (52)$$

Γ -nak az átlagos részecskemérettől való függését a 74. ábra mutatja. Látható, hogy a szobahőmérsékletű hevertetéssel Γ mintegy $0,15$ – $0,16 Jm^{-2}$ értéket ér el. Az 50°C -os hőkezelés során keletkező zónákban Γ értéke $0,18 Jm^{-2}$, a Si-et tartalmazó ötvözet esetében (17. ötvözet) $0,2 Jm^{-2}$. Figyelembe véve a Si igen csekély mennyiségét, ezt csak úgy tudjuk értelmezni, hogy a Si atomok beépülnek a GP zónákba és megnövelik a zónán belüli kémiai kötési erősségét.





74. ábra

Összefoglalás

Megvizsgáltuk a túlteltett szilárd oldat szétesésének folyamatát szobahőmérséklet és mintegy 200 °C között két iparilag alkalmazott Al—Zn—Mg ötvözetben.

Vizsgálatainkat döntően a röntgen kisszögű szórás módszerére alapoztuk, amely a szóban forgó ötvözet típus esetében kiválóan alkalmas a zónaképződési, a reverziós és a kiválásos folyamatok nyomon követésére, valamint a kialakult kiválásos szerkezet mikroszkopikus paramétereinek meghatározására. Azt találtuk, hogy szobahőmérséklet és kb. 60 °C között a szilárd oldat szétesése gömb alakú, 1,4 nm-nél nem nagyobb sugarú GP zónák képződésével megy végbe. A zónák kisszögű röntgen szórásában megfigyelhető részecskék közötti interferencia, figyelembe véve alacsony tér-

fogati hányadukat, arra utal, hogy a zónák bizonyos fokú rendezettséggel helyezkednek el a mátrixban. A zónák rendezett eloszlása erőteljesen csökken a Zn tartalom csökkenésével, illetve adott Zn tartalom mellett a hőmérséklet növekedésével. A zónák száma a szobahőmérsékleti hevertetés során nem változott észrevehetően, ami arra utal, hogy a zónák viszonylag gyors nukleációja után növekedésük a döntő folyamat.

Módszert dolgoztunk ki a zónák összetételének meghatározására. Ennek alapján meghatároztuk a szobahőmérsékletű GP zónák Zn és Mg összetételét. A zónák Zn tartalma 42at%-nak és az ezzel egyensúlyban levő szilárd oldaté 0,74at%-nak adódott. Az oldhatósági határ, valamint a zónák Zn koncentrációja nem függ az ötvözet Mg tartalmától, ha a Zn/Mg arány a következő határok közé esik: $0,5 < \text{Zn/Mg} < 2$. A zónák Mg tartalma $\text{Zn/Mg} = 2$ esetén 20at%-nak és csökkenő Zn/Mg arány mellett ennél nagyobbak, maximálisan 50at%-nak adódott.

Mintegy 60 °C-ig a keletkező zónák mérete és méreteloszlása megegyezik a szobahőmérsékleti zónáéval. 60 és kb. 100 °C között egyidejűleg két különböző típusú részecske alakul ki a mátrixban. A kisebb átlagméretű, GPI zóna a szobahőmérsékleti zónákkal azonos szerkezetű. A nagyobb átlagméretű, GPII zóna termodinamikailag stabilabb, nem oldódik fel teljes mértékben a reverziós hőkezelés során. Minden valószínűség szerint MgZn_2 összetételű és ennek megfelelően az η' átmeneti fázis magjainak valamiféle előzménye.

100 °C-on a szilárd oldat szétesése változatlanul két eltérő második fázisú részecske szimultán keletkezésével megy végbe. A szétesés kezdetén ezek a részecskék a GPI és GPII zónák. A hosszabb, kb. 10 órás hőkezelések után azonban a GPI zónák átnőnek GPII-vé, ugyanakkor a GPII zónák pedig átnőnek η' kiválásokká.

A GPII zónák megjelenésének alsó határhőmérséklete valamivel 60 °C fölé tolódik a Zn tartalom csökkenésével.

A 2,5at%-nál alacsonyabb Zn tartalmú Al—Zn—Mg ötvözetekben a szobahőmérsékleti zónák reverziója teljes. Ez azt jelenti, hogy az ötvözetek valamennyi fizikai tulajdonságának a zónaképződés során bekövetkező megváltozása visszaáll gyakorlatilag a szilárd oldat állapotnak megfelelő értékekre a reverziós hőkezelés során. Értelmezni tudtuk a reverzió hőmérséklet- és időfüggését a TTT diagram alapján. A GP szolvusz hőmérséklete fölött a zónaoldódáshoz hozzárendeltünk egy hőmérsékletfüggő időállandót. Az a hőmérséklet és a hozzá tartozó időtartam, ahol ez az időállandó görbe átmetszi az η' képződés inkubációs idejének megfelelő C görbét, tekinthető az ötvözet T_R reverziós hőmérsékletének és t_R reverziós időtartamának. A $T_{GP} < T < T_R$ hőmérsékleteken a kritikus méretnél nagyobb zónák átalakulnak az η' fázis részecskéibe és az ennél kisebb zónák feloldódnak. A $T \geq T_R$ hőmérsékleteken az általunk megadott modell szerint az η' fázis részecskéi a feloldódott GP zónák helyén megmaradó ötvöző atomcsoportokon nukleálódnak.

A 2,5at%-nál nagyobb Zn tartalmú ötvözetek esetében a reverzió és az η' fázis magképződése még bonyolultabbá válik, mivel az η' fázis magképződésének homogén-heterogén határa lényegesen magasabb hőmérsékletekre tolódik, mint a GP szolvusz. Ennek megfelelően a szokásos felfűtési sebességek mellett (~ 100 °C/perc) az ötvözet mindenképpen úgy halad keresztül a homogén η' képződés tartományán, hogy közben jelentős mértékben megindul az η' fázis képződése. Ennek megfelelően a szobahőmérsékleti GP zónák reverziója csak részlegesen megy végbe. Extrém nagy fűtési sebességekkel ilyen esetben is elérhető teljes reverzió, de az ilyen hőkezelés szinte egyenértékű az oldó hőkezeléssel, mivel ekkor a reverziós hőmérséklet már az η' szolvusz közelében van.

Fentieknek megfelelően kidolgoztunk egy nemegyensúlyi fázisdiagramot, amelynek alapján a szobahőmérsékleti GP zónák és az η' fázis nukleációja közötti kapcsolat, illetve a reverzió jelensége jól értelmezhető. Megállapítottuk, hogy T_R a Zn tartalom függvényében átmetszi az η' képződés homogén-heterogén fázishatárát. A metszésponthoz tartozó hőmérséklet, illetve Zn tartalom 160 °C, illetve 2,5at%. A 2,5at%-nál kisebb Zn tartalmú ötvözetekben a reverzió közel 100%-os az η' fázis képződésének megindulása előtt. A 2,5at%-nál több Zn-et tartalmazó ötvözetekben az η' fázis homogén nukleációja megindul a zónák feloldódása előtt, ennek megfelelően a reverzió csak részleges.

Az Al—1,9at%Zn—1,4at%Mg ötvözetben megvizsgáltuk a zónák és az η' kiválások hatását a szilárdságnövekedésre. Megállapítottuk, hogy mintegy 5 nm átlagos részecskeátmérőig a folyáshatár növekedése az átvágásos mechanizmussal történik. Ez a GP zónák és a jórészt koherens, nagy diszperzitású η' részecskék tartománya. A 6 nm átlagos részecskeátmérő fölött a szilárdság növekedése az Orowán mechanizmussal megy végbe. Ez a részben inkoherens η' és az ennél durvább kiválások tartománya.

Meghatároztuk a részecskeerősséget, valamint a részecskék átvágásához szükséges fajlagos felületi munkát az átvágásos mechanizmus működésének tartományában. A I fajlagos felületi munka monoton nő a zónaképződés során, majd egy telítési értéket ér el. Ez azt mutatja, hogy a zónákon belüli atomi kitések átlagos erőssége növekszik a zónaképződés elején, majd egy maximális, telítési értéket ér el.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szeretnék köszönetet mondani *dr. Kovács István* tanszékvezető egyetemi tanárnak, akinek állandó, önzetlen segítsége a jelen dolgozattal kapcsolatos egész munkámat végigkísérte és amely nélkül ez a dolgozat nem készülhetett volna el. Köszönettel tartozom *dr. Lendvai Jánosnak*, akinek baráti és munkatársi kapcsolata állandóan segítségemre volt.

Szeretném megköszönni *dr. Groma Gézának* és *dr. Kovács-Csetényi Erzsébetnek* a témával kapcsolatos állandó érdeklődését és támogatását. A velük való együttműködés előfeltétele volt ezen dolgozat elkészülésének.

Köszönettel tartozom az Aluterv—FKI székesfehérvári részlegének a minták egy részének elkészítéséért, továbbá az ELTE Atomfizikai Tanszékének, személy szerint *dr. Deák Ferencnek*, aki lehetővé tette a numerikus mérésiértékelések elvégzését TPA-i számítógépen.

Köszönetet mondok *dr. Groma Gézának* és *dr. Zsoldos Lehelnek*, a fizikai tudományok kandidátusainak a kézirat gondos átolvasásáért és hasznos megjegyzéseikért, melyek a végső változat elkészítésében nagy segítséget jelentettek.

IRODALOM

1. G. Eger, Z. Metallkde., 4, 29, 1913.
2. W. Sander und K. L. Meissner, Z. Metallkde., 15, 170, 1923; 16, 12, 1926.
3. L. F. Mondolfo, Int. Metall. Rev., 153, 95, 1971.
4. L. F. Mondolfo: Aluminium Alloys: Structure and Properties, Butterworths, London, 1976.
5. W. Köster und W. Wolf, Z. Metallkde., 28, 155, 1936.
6. W. Köster und W. Dullenkopf, Z. Metallkde., 28, 309, 363, 1936.
7. P. Y. Szal dau i M. I. Zamotorin, Zs. Anorg. Khim., 213, 377, 1933.
8. A. A. Bohar i M. O. Kuznyecov, Metallurg, 8, 7, 1933.
9. W. L. Fink and L. A. Willey, Trans. Amer. Inst. Min. Met. Eng., 124, 78, 1937.
10. P. Y. Szal dau, Izvest. Szekt. Fiz. Khim. Anal., 19, 487, 1949.
11. F. Laves und L. Lohberg, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, 1, 59, 1934.
12. F. Laves, K. Lohberg und H. Witts, Metallwirtschaft, 14, 793, 1935.
13. W. B. Pearson, Handbook of Lattice Spacings and Structure of Metals and Alloys, Pergamon Press, Oxford, 1958.
14. K. Riederer, Z. Metallkde., 28, 312, 1936.
15. G. Bergman, J. L. T. Waugh and L. Pauling, Acta Cryst., 10, 254, 1957.
16. H. Schmalzried und V. Gerold, Z. Metallkde., 49, 291, 1958.
17. A. Kelly and R. B. Nicholson, Progr. Mat. Sci., 10, 1, 1963.
18. H. Y. Hunsicker and H. C. Sumpf, History of Precipitation Hardening, Met. Soc. Conf., Vol. 27., ed. C. S. Smith, Gordon and Breach, New York, 1965.
19. J. Calvet, P. Jacquet and A. Guinier, J. Inst. Metals, 65, 121, 1939.
20. G. D. Preston, Proc. Roy. Soc., 167A, 526, 1938.
21. A. Guiner, Ann. Phys., 12, 161, 1939.
22. L. F. Mondolfo, N. A. Gjostein and D. W. Levinson, Trans. Amer. Inst. Min. Met. Eng., 206, 1378, 1956.
23. G. Thomas and J. Nutting, J. Inst. Metals, 88, 81, 1959—60.
24. J. D. Embury and R. B. Nicholson, Acta Met., 13, 403, 1965.
25. R. Graf, Compt. Rend., 242, 1311, 1956.
26. R. Graf, Compt. Rend., 244, 337, 1957.
27. M. Paic, Compt. Rend., 223, 272, 1946.
28. I. N. Fridljander, N. S. Gercsikova i N. I. Zaiceva, Metallovedenie i Term. Obrabot. Metallov, 1966 8, 11, 1966.
29. A. Saulnier and G. Cabane, Compt. Rend., 226, 181, 1948.
30. E. H. Dix, Trans. Amer. Soc. Metals, 42, 1057, 1950.
31. K. Asano and K. Hirano, Trans. Japan Inst. Metals, 9, 24, 1968.
32. V. B. Szpiridonov, T. A. Vlaszova i V. N. Jordanszki, Metallovedenie i Term. Obrabot. Metallov, 1966/8, 607, 1966.
33. R. B. Nicholson, G. Thomas and J. Nutting, J. Inst. Metals, 87, 429, 1958—59.
34. R. B. Nicholson, G. Thomas and J. Nutting, Brit. J. Appl. Phys., 9, 25, 1958.
35. V. M. Pastalszkij, A. F. Poleszja, Fiz. Metall. i Metalloved., 23, 60, 1967.
36. T. Williams, J. Inst. Metals, 91, 324, 1962—63.

37. P. A. Thackery, J. Inst. Metals, 96, 228, 1968.
38. L. F. Mondolfo, J. Inst. Metals, 97, 95, 1969.
39. G. W. Lorimer and R. B. Nicholson: The Mechanism of Phase Transformations in Crystalline Solids, Inst. Metals, London, 1969, p. 36.
40. M. H. Jacobs and B. W. Pashley, ugyanott, p. 43.
41. I. J. Polmear, J. Inst. Metals, 87, 24, 1958—59.
42. I. J. Polmear, J. Inst. Metals, 86, 113, 1957.
43. G. W. Lorimer and R. B. Nicholson, Acta Met., 14, 1009, 1966.
44. Y. Murakami, O. Kawano and H. Tamura, Mem. Fac. Eng. Kyoto Univ., 25, 303, 1963.
45. H. A. Holl, Metal Sci. J., 1, 111, 1967.
46. R. Graf., J. Inst. Metals., 86, 534, 1957—58.
47. B. Gentry, R. Graf and G. Lenoir, Compt. Rend., 247, 1731, 2126, 1958.
48. G. Thomas, J. Inst. Metals, 86, 536, 1957—58.
49. A. V. Dobromiszlov, O. D. Sasov i N. N. Buinov, Fiz. Metallov Metalloved., 24, 192, 1967.
50. S. E. Naess, Scripta Met., 3, 179, 1969.
51. K. Hirano and Y. Takagi, J. Phys. Soc. Japan, 10, 187, 1955.
52. J. H. Rogerson, Brit. Weld. J., 11, 12, 1964.
53. N. Ryum, Acta Met., 16, 327, 1968.
54. C. W. Morley and B. D. Burns, Nature, 185, 914, 1960.
55. R. W. Gould and E. A. Starke, Advances in X-Ray Analysis, 9, 59, 1966.
56. N. Ryum, Acta Met., 17, 269, 1969.
57. P. Bardhan and E. A. Starke, J. Mat. Sci., 3, 577, 1968.
58. H. A. Holl, J. Inst. Metals, 97, 200, 1969.
59. J. Gjønnes and C. Simensen, Acta Met., 18, 881, 1970.
60. V. O. Kawano, Y. Murakami, T. Nakazawa and K. S. Liu, Trans. Japan Inst. Met., 11, 12, 1970.
61. P. A. Thackery and A. T. Thomas, J. Inst. Metals, 99, 114, 1971.
62. K. Hirano and K. Asano, Trans. Japan Inst., Met., 11, 225, 1970.
63. H. Suzuki, M. Kanno and S. Asami, Keikinzoku, 22, 269, 1972.
64. H. Suzuki, S. Asami and M. Kanno, Keikinzoku, 22, 52, 1972.
65. S. Ceresara and P. Fiorini, Mat. Sci. Eng., 10, 205, 1972.
66. K. Hirano, Thermal Analysis: Comparative Studies on Materials, Ed. H. Kambe and P. D. Garn, John Wiley and Sons, New York, 1974, p. 42.
67. K. H. Dinkeloh, G. Kralik und V. Gerold, Z. Metallkde., 65, 291, 1974.
68. Y. Tomita, K. S. Liu, Y. Murakami and M. Morinaga, Trans. Japan Inst. Metals, 15, 99, 1974.
69. N. Ryum, Z. Metallkde., 66, 338, 344, 1975.
70. C. E. Lyman and J. B. Vander Sande, Met. Trans., 7A, 1211, 1976.
71. P. E. Marth, H. I. Aaronson, G. W. Lorimer, T. L. Bartel and K. C. Russell, Met. Trans., 7A, 1519, 1976.
72. K. Asano, M. Abe and A. Fujiwara, Mat. Sci., Eng., 22, 61, 1976.
73. P. J. Brofman and G. Judd, Met. Trans., 9A, 457, 1978.
74. E. Hornbogen, Met. Trans., 9A, 134, 1978.
75. A. Melander and P. A. Persson, Acta Met., 26, 267, 1978.
76. A. Zahra, C. Y. Zahra, M. Laffitte, W. Lacombe and H. P. Degischer, Z. Metallkde., 70, 172, 1979.
77. A. Durer und W. Köster, Z. Metallkde., 30, 311, 1938.
78. J. Burke, The Kinetics of Phase Transformations in Metals, Pergamon Press, Oxford, 1965.
79. J. W. Christian, The Theory of Transformations in Metals and Alloys, Pergamon Press, Oxford, 1970.
80. A. H. Geissler, Phase Transformations in Solids, John Wiley, New York, 1951.
81. R. E. Smallmann, Modern Physical Metallurgy, Butterworth, London, 1963.
82. Lendvai János, Magyar Fizikai Folyóirat, 26, 245, 1978.
83. M. Radomsky, O. Kabisch, H. Löffler, K. H. Sackewitz, G. Honyek, T. Ungár, J. Lendvai and I. Kovács, Krist. Techn. 14, 625, 1979.
84. A. J. Cornish and M. K. B. Day, J. Inst. Metals, 97, 44, 1969.
85. H. W. King, J. Mat. Sci., 1, 79, 1966.
86. P. Krishnamurti, Indian J. Phys., 5, 473, 1930.
87. A. Guinier, Compt. Rend., 206, 1374, 1938; 206, 1641, 1938.
88. O. Kratky und F. Schossberger, Z. Elektrochem., 43, 666, 1937.
89. R. Hosemann, Z. Physik, 113, 751, 1939.
90. A. Guinier and G. Fournet: Small Angle Scattering of X-Rays, John Wiley and Sons., New York, 1955.

91. *H. Hosemann and S. N. Bagchi*: Direct Analysis of Diffraction by Matter, North-Holland Publ. Co., Amsterdam, 1962.
92. *H. Brumberger, Gordon and Breach* (ed.): Proceedings of the Conference on Small Angle X-Ray Scattering, New York, 1966.
93. *A. Guinier*, X-Ray Diffraction in Crystals, Imperfect Crystals and Amorphous Bodies, *W. H. Freeman*, San Francisco, 1963.
94. *V. Gerold*, Proc. Conf. Small Angle X-Ray Scattering, ed. *H. Brumberger, Gordon and Breach*, New York, 1966, p. 277.
95. *J. W. M. Du Mond*, Phys. Rev., 72, 83, 1947.
96. *J. A. Lake*, Acta Cryst., 23, 191, 1967.
97. *P. W. Schmidt*, J. Appl. Cryst., 3, 137, 1970.
98. *J. S. Lin, C. R. Von Bastian and P. W. Schmidt*, J. Appl. Cryst., 7, 439, 1974.
99. *C. G. Shull and L. C. Roess*, J. Appl. Phys., 18, 295, 1947.
100. *V. Luzzati*, Acta Cryst., 13, 939, 1960.
101. *G. Porod*, Z. Naturforsch., A4, 301, 1949.
102. *G. Porod*, Kolloid Z., 124, 83, 1951.
103. *G. Porod*, Kolloid Z., 125, 51, 1951.
104. *G. Fournet*, Acta Cryst., 4, 293, 1951.
105. *G. Fournet*, J. phys. radium, 12, 592, 1951.
106. *G. Laslas, G. Kostorz, M. Roth, P. Guyot and R. J. Stewart*, phys. stat. sol., 41a, 577, 1977.
107. *B. Anfimov, A. Dontsov, E. Ferracini, A. Ferraro, R. Hosemann and F. Riva*, Makromol. Chem., 176, 2467, 1975.
108. *V. Gerold und W. Schweizer*, Z. Metallkde., 52, 76, 1961.
109. *R. Baur and V. Gerold*, Acta Met., 10, 637, 1962.
110. *K. H. Dönkeloh, V. Gerold and G. Kralik*, Proc. 3. Int. Conf. Strength Metals and Alloys, Cambridge, vol. 1, 1973., p. 296.
111. *V. Gerold*, J. Appl. Cryst., 10, 25, 1977.
112. *V. Gerold, J. E. Epperson and G. Kostorz*, J. Appl. Cryst., 10, 28, 1977.
113. *V. Gerold and G. Kostorz*, J. Appl. Cryst., 11A, 84, 1978.
114. *G. Groma, I. Kovács, E. Kovács—Csetényi, J. Lendvai and T. Ungár*, Phil. Mag., A, 40, 653, 1979.
115. *H. Kiessig*, Kolloid Z., 98, 213, 1942.
116. *B. A. Parker*, J. Appl. Cryst., 5, 372, 1972.
117. *O. Kratky, G. Porond und L. Kahovek*, Z. Elektrochem., 55, 53, 1951.
118. *Hajdú Ferenc, Pálkás Gábor és Hernádi József*, Szabadalmi leírás, OTH 163 906, 1975.
119. *O. Kratky, I. Pilz and P. J. Schmitz*, J. Colloid Interface Sci., 21, 24, 1966.
120. *I. Pilz and O. Kratky*, J. Colloid Interface Sci., 24, 211, 1967.
121. *I. Pilz*, J. Colloid Interface Sci., 30, 140, 1969.
122. *A. M. Levelut and A. Guinier*, Proc Conf. Small Angle X-Ray Scattering, *H. Brumberger, Gordon and Breach*, 1966, p. 351.
123. *G. Siebel*, Metallforschung, 2, 331, 1947.
124. *G. Siebel*, Z. Metallkde., 40, 162, 1949.
125. *H. Klatte*, Werkstoffe u. Korrosion, 7, 708, 1956.
126. *T. Ungár*, Z. Metallkde., 70, 739, 1979.
127. *A. Guinier*, Solid State Phys., 9., 294, 1959.
128. *H. Bossac, H. G. Fabian, O. Kabisch and H. Löffler*, Neue Hütte, 21, 560, 1976.
129. *Verő József és Káldor Mihály*, Fémten, Tankönyvkiadó, Budapest, 1977.
130. *A. Prince*, Alloy Phase Equilibria, Amer. Elsevier Publ. Co., New York, 1966.
131. *J. Lendvai, G. Honyek and I. Kovács*, Scripta Met., 13, 593, 1979.
132. *T. Ungár, J. Lendvai, I. Kovács, G. Groma and E. Kovács—Csetényi*, J. Mat. Sci., 14, 671, 1979.
133. *J. L. Taylor*, J. Inst. Metals, 92, 301, 1963/64.
134. *N. Ryum*, Z. Metallkde., 66, 377, 1975.
135. *G. Groma, E. Kovács—Csetényi, I. Kovács, J. Lendvai and T. Ungár*, Z. Metallkde., 67, 404, 1976.
136. *T. Ungár, J. Lendvai, I. Kovács, G. Groma and E. Kovács—Csetényi*, Z. Metallkde., 67, 683, 1976.
137. *E. Kovács—Csetényi és G. Groma*, Coll. Abstr. Second Int. Conf. Age Hardenable Al Alloys, Visegrád, 1979. CSS8.
138. *I. Kovács, J. Lendvai and E. Nagy*, Acta Met. 20, 975, 1972.
139. *J. Lendvai, I. Kovács and E. Nagy*, phys. stat. solidi, 14a, 83, 1972.

140. G. Groma and E. Kovács—Csetényi, *Phil. Mag.*, 32, 689, 1975.
141. T. Ungár, J. Lendvai and I. Kovács, *Aluminium*, 55, 663, 1979.
142. O. Kabisch, G. Zoch, H. Löffler, *Proc. 1. Int. Conf. Age Hardenable Aluminium Alloys*, Halle, 1977, p. 31.
143. G. Zoch, O. Kabisch, H. Löffler, W. Oettel, T. Ungár, G. Honyek, J. Lendvai and I. Kovács *ugyanott*, p. 32.
144. G. Várhegyi, G. Groma and M. Lengyel, *Thermochim. Acta*, 30, 311, 1979.
145. J. Lendvai, I. Kovács, T. Ungár, J. Lakner and K. Banizs, *Aluminium*, 56, 453, 1980.
146. H. Bossac, H. G. Fabian, G. Jürgens, M. Kampe, E. Korngiebel, H. Löffler and W. Oettel, *Krist. Tech.*, 11, 5, 1976.
147. G. Groma and Zs. Szentirmay, *Scripta Met.*, 12, 991, 1978.
148. B. Prasad and A. K. Malik, *Metallography*, 6, 527, 1973.
149. I. Kovács, J. Lendvai, T. Ungár, K. Banizs and J. Lakner, *Aluminium*, 53, 497, 1977.
150. G. Honyek, T. Ungár and I. Kovács, *Coll. Abstr. VIII. Hung. Diff. Conf.*, 1976, p. 83.
151. G. Panseri and T. Federighi, *Acta Met.*, 11, 575, 1963.
152. K. H. Sackewitz, M. Radomsky, H. Löffler, O. Kabisch, T. Ungár, G. Honyek, J. Lendvai and I. Kovács, *Kristall u. Techn.* 14, 457, 1979.
153. V. Gerold, *Z. Metallkde.*, 62, 796, 1971.
154. L. M. Brown and R. K. Ham, *Strengthening Methods in Crystals*, ed. A. Kelly and R. B. Nicholson, Elsevier, Amsterdam, 1971.
155. M. E. Fine, *Met. Trans.*, 6A, 625, 1975.
156. I. Kovács, J. Lendvai, T. Ungár, T. Turmezey and G. Groma, *Acta Met.*, 25, 673, 1977.
157. Kovács István, Átvágható kiválások szilárdságnövelő hatása Al ötvözetekben, X. Kohászati Anyagvizsgáló Napok, Balatonaliga, 1979. 37. old.
158. I. Kovács and L. Zsoldos, *Dislocations and Plastic Deformation*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
159. Kovács István és Lendvai János, Szilárdtestkutatás újabb eredményei, 11. (szerk. Siklós Tivadar), Akadémiai Kiadó, Budapest, 1981. p. 200.
160. J. Friedel, *Dislocations*, Pergamon Press, London, 1964. p. 224.
161. E. Orowan, *Symposium on Internal Stresses in Metals and Alloys*, Inst. Metals, 1948. p. 451.
162. U. F. Kocks, *Phil. Mag.*, 13, 541, 1966.
163. A. J. E. Foreman and M. J. Makin, *Phil. Mag.*, 14, 911, 1966.
164. Kovács István, Lendvai János és Ungár Tamás, A mikroszerkezet és a mechanikai tulajdonságok kapcsolata az Al—Zn5—Mg1 ötvözetben, X. Kohászati Anyagvizsgáló Napok, Balatonaliga, 1979. 202. old.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat nyomdába érkezett: 1981. Terjedelem: 9,10 (A/5) ív
81-5268 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató

Ára: 15.— Ft
Előfizetés kötetenként: 90,— Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Ungár Tamás:</i> Metastabil fázisok keletkezése, stabilitása és hatása a fizikai tulajdonságokra Al—Zn—Mg ötvözetekben	1
--	---

307.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

FÁZISÁTALAKULÁSOK A NEMESÍTHETŐ, KÖZEPES SZILÁRDSÁGÚ AlZnMg ÖTVÖZETEK BEN*

GROMA GÉZA
Aluterv-FKI, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	104
1. Kísérleti módszerek	105
2. Az AlZnMg rendszer fázisai	107
3. Gp zónák képződése	108
3.1. Irodalmi előzmények	108
3.2. A szobahőmérsékleten képződő zónák összetétele	112
3.3. A zónaképződés kinetikája szobahőmérsékleten	115
3.4. A szennyezők hatása a zónaképződésre	119
3.5. Zónaképződés szobahőmérséklet felett	122
4. Zónák reverziója; újraöregedés	123
4.1. Irodalmi áttekintés	123
4.2. Szobahőmérsékleti zónák reverziója	126
4.3. A szennyezők befolyása a szobahőmérsékleten képződött zónák reverziójára	132
4.4. A magasabb hőmérsékleten képződött zónák reverziója	132
4.5. Újraöregedés szobahőmérsékleten	133
5. GP zónák hatása	134
5.1. Szobahőmérsékleten képződött zónák ellenállásjáruléka	134
5.2. A zónák hatása a mechanikai tulajdonságokra	137
6. Az átmeneti η' fázis	141
6.1. Az irodalmi eredmények áttekintése	141
6.2. Az átmeneti fázis nukleációja	145
6.3. Az η' képződése	147
6.4. A szennyezők hatása az η' képződésének a hőmérséklettartományában	150
6.5. η' stabilitása, utóöregedés	152
6.6. η' hatásai	153
7. Inkohérens fázisok az AlZnMg ötvözetekben	153
7.1. Irodalmi összefoglaló	153
7.2. Kiválások képződése	158
7.3. A kiválások bomlása	167
8. Összefoglalás	168
Köszönetnyilvánítás	171
Irodalomjegyzék	172

BEVEZETÉS

Az AlZnMg ötvözetek kedvező mechanikai tulajdonságait már a húszas években (*Sauder és Miser*, 1923, 1926) felismerték, az ötvenes évek közepén terelődött azonban rájuk komolyabban a figyelem. Ekkor *Graf* röntgendiffrakciós vizsgálataival szobahőmérséklet környezetében Guiner-Preston (GP) zónák képződését,

* Érkezett 1980. jún. 27-én

magasabb hőmérsékleten pedig kiválásos nemesedést figyelt meg bennük. Azóta az egyik legelterjedtebb alumíniumötvözet-típussá váltak. Nagy ötvöztartalmú, illetve 1—2 t% rezet tartalmazó változatai a legnagyobb szilárdságú alumíniumötvözetek, amelyeket elsősorban a repülőgép- és rakétaipar használ, a közepes ötvöztartalmúak (1—5 t% Zn, illetve Mg) pedig elsősorban az építő- és járműipar szerkezeti anyagaként terjedtek el. A magyar alumíniumipar az utóbbiakkal erőteljesen foglalkozik.

A közepes szilárdságú AlZnMg ötvözeteknek a gyakorlati felhasználás szempontjából fontos tulajdonsága a jó hegeszthetőség. Ugyanakkor hátrányuk, hogy — elsősorban a hegesztett állapotban — meglehetősen érzékenyek a feszültségi korrózióra.

Az ALUTERV—FKI-ban hosszabb ideje kiterjedt kutató-fejlesztő munka folyik a különböző felhasználási területeknek megfelelő ötvözet-típusok kidolgozására, a hegesztés hatásának, a hegesztést követő utónemesedésnek, valamint a feszültségi korróziós tulajdonságoknak a tisztázására. Ebbe a munkába kapcsolódott bele 1973-ban a szerző is. Feladata a jelenségek fizikai hátterének, elsősorban a technológiai folyamatok közben lejátszódó fázisátalakulásoknak a felderítése volt.

A dolgozat ennek a munkának a során elért eredmények egy részét foglalja magában, azokat a fázisátalakulási folyamatokat, amelyek az anyagot ért hőhatások során a mátrixban játszódnak le. Az ésszerű méretek miatt nem térünk itt ki a törési tulajdonságok szempontjából rendkívül fontos szemcsehatármenti jelenségekre, illetve a korróziós sajátságok javítására hivatott adalékok hatására. Ezekben a vizsgálatokban a szerző szintén részt vett, itt azonban most csak a témakörben megjelent dolgozatokat soroljuk fel: *Buray és munkatársai* (1976), *Groma* (1976/a., b., c.), *Groma és Kovács—Csetényi* (1979), *Szentirmay és Groma* (1979). Ugyancsak nem foglalja magában az értekezés a témakörhöz csatlakozó diffúziós vizsgálatokat sem (*Gödény és munkatársai* 1975; *Groma és munkatársai* 1976, *Beke és munkatársai* 1977), csak ennek eredményeit használja fel.

A vizsgálatok célja minden esetben a gyakorlatilag fontos ötvözetekben a szokásos hőkezelési eljárások, a hegesztési hőbefolyás, illetve az utónemesedés hatására kialakuló állapotok tisztázása volt. Ott, ahol ez a jelenségek megértése szempontjából szükségesnek mutatkozott, nagy tisztaságú ötvözeteken is végeztünk vizsgálatokat, szélesebb tartományban változtattuk az összetételt, illetve a hőkezelések paramétereit. Végül a technikai és nagy tisztaságú ötvözetek tulajdonságainak összekapcsolása érdekében néhány vizsgálat történt az alumínium két legfontosabb szennyezője, a vas és a szilícium hatásának a tisztázása érdekében is.

Az értekezésben ismertetett munka egy széles körű hazai kutatási összefogás eredményét tükrözi. Az ALUTERV—FKI munkatársain kívül igen intenzíven részt vett benne az ELTE Általános Fizika Tanszéke, és bekapcsolódott a KLTE Alkalmazott Fizikai Tanszéke, az MTA Szervetlen Kémiai Kutató Laboratóriuma, valamint a NME Fémtani Tanszéke is. A szerző feladata volt ennek a kutatómunkának az irányítása, koordinálása és az eredmények nagy részének az értelmezése is.

A dolgozatban részletesen tárgyalt eredményekről készült saját publikációkat az irodalomjegyzék első, számozott részében foglaltuk össze.

1. Kísérleti módszerek

A vizsgálatok elsősorban három alapvető ötvözet típusra összpontosultak. Ezek egyike azonos számú Zn- és Mg-atomot tartalmazott, a másokban az η fázis sztöchiometriai összetételének megfelelően $\text{Zn/Mg}=2$, a harmadikban ehhez képest magnéziumtöbblet volt. Az első két ötvözetből egy-egy, az utóbbiból két, kissé különböző összetételű, a hazai gyártásban használatos, illetve az érdeklődésnek megfelelő adalékokat és szennyezőket tartalmazó adagot állítottak elő a szokásos üzemi körülmények között végzett olvasztást követő félfolyamatos öntéssel. Ezekből homogenizálás után meleghengerléssel 8 mm-es lemezek készültek, majd hideghengerlés után forgácsolással, illetve kivágással állítottuk elő a különböző vizsgálatokhoz szükséges mintákat. Az egyes ötvözetek összetételét az I. táblázat mutatja.

Egy sor különböző összetételű ötvözet készült *nagy tisztaságú* alapon is, ami többek között magában foglalta a technikai tisztaságú három alapötvözet-típus nagy tisztaságú változatát (5., 6., 13. ötvözet) is. Az I. táblázat ezeknek az összetételét is megadja. A nagy tisztaságú ötvözetek készítéséhez 99,999% Al- és 99,99% Zn-, illetve Mg-tartalmú fémeket használtunk. Ezekből hántolás és felületmaratás után indukciós olvasztást követően $110 \times 30 \times 10$ mm-es lapkákat öntöttünk, és a 480°C -on 1 órás homogenizálást követő hideghengerlés után ugyancsak forgácsolással, illetve kivágással készültek a minták.

Hasonló technológiát alkalmaztunk a Fe-sal, illetve Si-mal különböző mértékben tudatosan szennyezett mintáknál is. Ezek összetételét azonban az I. táblázatban nem tüntettük fel.

I. TÁBLÁZAT

A vizsgált ötvözetek összetétele

Ötv. jele	Zn		Mg		Fe		Si		Ti		Mn		Cr		Zr	
	at %	t %	at %	t %	at %	t %	at %	t %	at %	t %	at %	t %	at %	t %	at %	t %
I.	1,9	4,6	1,8	1,6	0,07	0,13	0,09	0,09	—	—	0,06	0,11				
II.	2,0	4,9	1,2	1,1	0,11	0,22	0,11	0,11	0,02	0,06	0,015	0,03	0,14	0,26	0,07	0,13
III.	1,3	3,2	2,4	2,2	0,17	0,34	0,25	0,25	0,05	0,10	0,08	0,17				
IV.	1,4	3,3	2,8	2,6	0,15	0,29	0,23	0,23	0,07	0,12	0,04	0,09				
1.	2,5	6,0	3,3	3,0												
2.	2,5	6,0	1,1	1,0												
3.	2,0	4,7	1,1	1,0												
4.	1,9	4,5	1,1	1,0												
5.	1,9	4,5	1,7	1,6												
6.	1,5	3,5	2,8	2,5												
7.	1,5	3,5	1,2	1,1												
8.	1,0	2,4	0,6	0,6												
9.	1,5	3,8	2,1	1,9												
10.	2,5	6,1	3,9	3,5												
11.	0,7	1,7	1,1	1,0												
12.	1,5	3,5	1,1	1,0												
13.	2,1	5,0	1,1	1,0												
14.	4,0	9,6	3,9	3,5												
15.	5,0	12,1	2,4	2,2												
16.	1,5	3,6	3,9	3,5												
17.	2,5	6,0	6,0	5,5												
18.																

Az oldó hőkezelés csaknem minden esetben $480 \pm 5^\circ\text{C}$ -on történt 30 percig. Kivételt csak az oldási hőmérséklet hatásának tisztázására végzett néhány mérés képezett. Az oldás hőmérsékletéről a mintákat általában szobahőmérsékletű vízben edzettük. Néhány esetben történt edzés közvetlenül az öregítés hőmérsékletére is. Az öregítés szobahőmérsékleten hevertetéssel, $30\text{--}90^\circ\text{C}$ között vízben, $90\text{--}240^\circ\text{C}$ között olajban, termosztátban történt. 240°C felett az öregítést ellenállásfűtésű kemencében végeztük. Az öregítő hőkezelés hőmérsékletének pontatlansága a termosztátban végzett hőkezeléseknél nem volt nagyobb $\pm 0,2^\circ\text{C}$ -nál, a kemencében $\pm 1^\circ\text{C}$ -nál. A külső intézményeknél a helyi adottságoknak megfelelően az öregítés esetenként más körülmények között történt, a hőmérséklet pontatlansága azonban soha nem haladta meg a fentieket.

Az ötvözők *analízisét* nedves kémiai, a szennyezőkét spektroszkópai módszerrel végezte az ALUTERV—FKI Analitikai Osztálya.

A *szakítóvizsgálatokhoz* $80 \times 2 \times 0,5$ mm-es mintákat használtunk, a mérések Instron, illetve FM-250 típusú szakítógépen történtek.

A szennyezőhatások vizsgálatánál a Brinell-keménységet $2,5$ mm-es átmérőjű golyóval 625 N terhelőerővel és 30 s terhelési idővel mértük, a Vickers-keménység méréseire pedig 50 N terhelőerőt alkalmaztunk.

Az *elektromos ellenállás* mérések részben $6 \times 6 \times 80$ mm-es rudakon történtek 50 mm-es mérési hosszon a szokásos potenciométeres módszerrel a cseppfolyós nitrogén forráspontján, vagy in situ az öregítés közben. Az utóbbi esetben a mérés $0,2 \times 2 \times 120$ mm-es mintán történt.

Hajtottunk végre egyidejű *ellenállás és termofeszültség* méréseket is. Ezek $0,2 \times 2 \times 60$ mm-es próbatesteken történtek. A termofeszültség méréseknél a referencia próbatest $99,99\%$ Al-ból készült. A mérési adatok alapján Nordheim—Gorther-diagramokat (Gorther 1935) szerkesztettünk. Elkészítésük során a GP zónáktól és a szilárdoldattól származó ellenállás-összetevők szétválasztásához felhasználtuk azt az értekezésben tárgyalt megállapításunkat, hogy a szobahőmérsékleten metastabil állapotban levő zónákban $\text{Zn/Mg} \approx 1$, ellenállás járulékkuk pedig a térfogati hányaduk $\frac{2}{3}$ -ik hatványával arányos. Feltételeztük továbbá, hogy a zónák termofeszültség járulaka elhanyagolhatóan kicsi. Az értékelés részleteit a témakörben megjelent egyik dolgozat (Groma és Szentirmay 1978) tartalmazza.

A *röntgen kisszögű szórás* intenzitás-eloszlásának mérése szobahőmérsékleten lejátszódó folyamatok esetén egy Kratky-típusú Anton—Paar-kamrával történt lupolen hitelesítő minta felhasználásával. Magasabb hőmérsékleteken a folyamatok in situ követésére Ungár Tamás egy Kiessig-típusú AEG kamrát módosított úgy, hogy a filmtartója helyére szcintillációs számlálót helyezett, amellyel 2θ -nak a $0,5\text{--}3,5^\circ$ közé eső tartományában az integrális intenzitás eloszlást mérte. A kamra mintatartója mikrokályhával van ellátva, melyben a hőmérséklet $\pm 2^\circ\text{C}$ pontossággal 500°C -ig szabályozható. A berendezés részletesebb leírása Ungár és munkatársai dolgozatában (1979) található. A röntgen kisszögű szórás mérések mindkét kamra esetén Ni-ben szűrt CuK_α sugárzással történtek. A mérésekből a zónák, illetve az átmeneti fázis térfogati hányada, a Guinier-féle sugár (Guinier és munkatársai 1955), a részecskék sugara és sűrűsége Gerold (1966) módszerével meghatározható.

Az *elektronmikroszkópi és elektrondiffrakciós* vizsgálatokhoz JEM 100C, illetve JEM 200A berendezéseket használtunk. Az utóbbi fűthető mintatartóval is el volt látva, így alkalmas volt in situ megfigyelésekre. A kiválások szerkezetének és orien-

Asano és Hirano 1968) ebben az esetben η -t átmeneti fázisnak tekintik, jóllehet a közvetlen $\eta \rightarrow T$ átalakulást soha nem figyelte meg senki (Mondolfo 1971).

Thackery 1968-ban nagy sebességgel lehűtött minták elektronmikroszkópos vizsgálata alapján egy Mondolfonál nem szereplő fázisról, a szerinte valószínűleg hexagonális X fázisról számolt be, amelynek az összetételét azonban nem tudta meghatározni. Auld és Cousland (1976) az X fázist metastabil T' -nek tekinti, meghatározta az elemi cellájának a méreteit és a mátrixhoz viszonyított orientációját.

Subbarao (1972) doktori értekezésében még egy hexagonális fázist ismertet, melyet R -rel jelöl, rajta kívül azonban ezt más nem észlelte.

Bár az AlZnMg ötvözetrendszerben a fázisviszonyokkal rendkívül sok dolgozat foglalkozik (Mondolfo 1971-ben készült összefoglaló dolgozatában több, mint 500-at használt fel), számos alapvető kérdés ma is tisztázatlan. A jelen dolgozatban ezek közül csak a számunkra fontosakkal fogunk foglalkozni. A felépítésben az öregítési folyamatok fenti sorrendjét követjük.

3. GP zónák képződése

3.1. Irodalmi előzmények

A GP zónák szerkezetéről legjobban a röntgenszórás intenzitáseloszlása alapján tudunk képet alkotni. Az összetétel meghatározására két módszert használnak. Az egyiknél a röntgenszórási képből igyekeznek meghatározni a zóna atomi szerkezetét, és az ebből adódó összetételt tekintik a zóna összetételének. A másik kisszögű szórás mérésekből állapítja meg a kiválásban és a maradék mátrixban az ötvözők koncentrációját. Gerold és Schweitzer (1961), valamint Baur és Gerold (1962) szerint ugyanis a kisszögű szórás J intenzitása a következő összefüggésben van egy biner ötvözetnél az ötvözőkoncentrációkkal:

$$\frac{JV_a}{(\Delta b)^2} + x^2 = (x_1 + x_2)x - x_1x_2, \quad (3.1)$$

ahol x az átlagos, x_1 a szétválasztás után a mátrixban visszamaradó, x_2 a zónabeli koncentráció, V_a az atomtérfogat, Δb pedig a két komponens szórási tényezőjének az eltérése. (3.1) jobb oldala lineáris függvénye x -nek mindazokra az ötvözetekre, amelyek azonos összetételű zónára és mátrixra esnek szét, tehát azonos konóda (tie-line) mentén fekszenek. Az egyenes iránytangenséből és tengelymetszetéből x_1 és x_2 meghatározható.

Terner ötvözetünkénél a Zn szórási tényezője röntgensugárzásra erősen eltér a másik két komponensétől, így a Zn-koncentrációk ennek segítségével meghatározhatók. A Mg-koncentrációk vizsgálatára a neutronszórás ad lehetőséget.

A szobahőmérsékleten képződő zónák szerkezetére az első modellt Graf (1956/a, b, 1957) adta. Ennek értelmében a zónákban a mátrix $\{100\}$ síkjai mentén egymást váltogató Zn és Mg rétegek helyezkednek el. A modellt, amelynek alapján a zónákban $\text{Zn:Mg}=1:1$, Schmalzried és Gerold (1958) tovább finomította. Szerintük a Mg atomokat Al atomok is helyettesíthetik a zónában.

Hasonlóan $\text{Zn:Mg}=1:1$ összetételre következtettek a röntgenszórási kép alapján Kawano és munkatársai (1970) is.

Kis Mg tartalmú ötvözetekben *Gerold* és *Haberkorn* (1959) szerint Mg_2Zn_5 típusú zónák képződnek, *Suzuki* és *munkatársai* (1972/d), valamint *Tomita* és *munkatársai* (1974) véleménye pedig az, hogy ezekben az ötvözetekben egy AlZn típusú zóna koegzisztál a MgZn zónákkal.

Kisszögű röntgenszórásból *Dünkeloh* és *munkatársai* (1973, 1974) azonos konóda mentén fkvő, 5 at%-nál nem több Zn-et tartalmazó ötvözet GP zónáiban a hosszú ideig tartó szobahőmérsékleti hevertetés során beállt metastabil állapotban 40,1 at% Zn-tartalmat állapított meg, ugyanakkor a szilárdoldatban a szerzők szerint 0,8 at% Zn maradt vissza. Egy későbbi dolgozatukban *Gerold* és *munkatársai* (1977) a szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyban levő zónák Zn-tartalmára az összetételtől függően 56—58 at%-ot adtak meg.

Barthan és *Starke* (1968) úgy véli, hogy az ötvözetben a nagyobb Mg-koncentráció a zónában nagyobb Zn-koncentrációt eredményez.

Bár a mérés nehéz és a mai körülmények között meglehetősen pontatlan, az utóbbi időben kísérlet történt kisszögű neutronszerzés vizsgálatok alapján a zónák Mg-koncentrációjának a meghatározására is (*Gerold* 1977, *Gerold* és *munkatársai* 1977), amire a szerzők — ugyancsak az összetételtől függően — 17—38 %-ot kaptak.

A szobahőmérséklet környezetében lejátszódó zónaképződés folyamatát sokan tanulmányozták. Ezek alapján meglehetősen egybehangzó az a vélemény, hogy a binér AlZn ötvözzel ellentétben itt az edzéskor keletkező többletvakanciák száma gyakorlatilag nem befolyásolja a zónaképződés kinetikáját (*Ryum* 1968, *Gerold* és *munkatársai* 1970, *Jürgens* és *munkatársai* 1974/a.). *Murakami* és *munkatársai* (1969) megfigyelték, hogyha a biner ötvözethez 0,1% nagyságrendben egyre több Mg-t adagoltak, a nemesedés vakanciaérzékenysége fokozatosan csökkent. Ugyanakkor *Panseri* és *Federighi* (1963) egy rövid, kezdeti szakaszban ki tudott mutatni vakanciahatást nagyobb Mg-tartalom esetén is.

Murakami és *munkatársai* (1969), valamint *Suzuki* és *munkatársai* (1972/c.) azt tapasztalták, hogyha a biner AlZn -be Mg-t viszünk be, a zónaképződés egy kezdeti, gyorsabb szakasztól eltekintve lelassul. Ezt többen úgy értelmezték, hogy a kinetikát a lassúbb Mg-komponens szabja meg. A Mg ugyanis gyakorlatilag teljesen leköti a vakanciákat (*Panseri* és *Federighi* 1963, *Barthan* és *Starke* 1968, *Naess* 1969, *Jürgens* és *munkatársai* 1974/a., b.). Emellett szól, hogy a zónanövekedés aktiválási energiája *Ceresara* és *Fiorini* (1972) mérései alapján 0,67 eV, *Schmalzried* és *Gerold* (1958) szerint pedig 0,85 eV. Mindkét érték közel esik a Mg mozgási aktiválási energiájához.

Több, de csak közvetett bizonyíték szól amellett, hogy a zónaképződés Zn atomcsoportok kialakulásával kezdődik. *Naess* (1969) pl. kimutatta, hogy a mátrix rácsparamétere a zónaképződés kezdetén nő, majd erőteljesen csökken. Tekintettel a Zn —4%-os és a Mg +14%-os mérethatására az Al-ban, *Naess* a változást úgy magyarázta, hogy a zónaképződés a Zn-atomok összecsoportosulásával indul, és csak később kezdődik a ZnMg összetételű zónák kialakulása. *Jürgens* és *munkatársai* (1974/a., b., 1976) Young-modulusz méréseik alapján feltételezik, hogy a zónaképződés kezdeti szakaszában a Zn/Mg aránytól függően Zn-vakancia, illetve Zn_2 -vakancia komplexek mozgása dominál. Hasonló következtetésre jutottak *Suzuki* és *munkatársai* (1972/c.) is, amikor a Zn/Mg arány hatását vizsgálták a nemesedésre. A Zn— ZnMg típusú zónaváltással magyarázza *Ryum* (1969) is a keményedési karakterisztika általa észlelt két szakaszát.

Sok szerző vizsgálta szobahőmérséklet környezetében a zónaképződés kinetikáját. Az ellenállás — ellentétben a kétalkotós AlZn ötvözetekkel — az igen kevés magnéziumot tartalmazó ötvözetektől eltekintve (Panzeri és Federighi 1963, Suzuki 1972/c.) szobahőmérsékleten nem mutat maximumot (Ohta és Hashimoto 1964, Ceresara és Fiorini 1972). Polmear (1957—58) vizsgálatai azt mutatták, hogy a keménység inkubációval indul, majd az idő logaritmusaival lineárisan nő. A lineáris szakaszt többek szerint (Köstner és Kam 1938, Herenguel és Chaudron 1941, Polmear 1957—58, Asano és Hirano 1968/a., Hirano 1974) egy plató követi. A két utóbbi dolgot ezután egy újabb, erőteljes növekedést említ. Hasonló jelleggel változott Asanonál és Hiranonál (1968/a.) a kaloriméteres csúcs területe is. Dünkeloh és munkatársai (1974) a zónák Guiner-sugara és az idő logaritmusa között kaptak lineáris összefüggést, amíg a Guiner-sugár el nem érte a 2 nm-t. Az egyenes meredeksége különböző Zn₂Mg összetételű ötvözeteknél függetlennek adódott a koncentrációtól. Lyman és Vander-Sande (1976) elektronmikroszkópos vizsgálatai alapján ezzel szemben a zónák méretére az $r \sim t^{1/9}$ összefüggést tudta illeszteni.

A szobahőmérsékleten képződő zónák maximális méretére más szerzők is Dünkelohékhoz hasonló felső határt adnak meg: Schmalzried és Gerold (1958) 2,5, Nicholson és munkatársai (1958—59) 1,5 nm-t, Kawano és munkatársai (1970) 2 nm-t. Ezzel szemben Graf (1957) 6, Romanova és munkatársai (1967) 10 nm-es zónák megfigyeléséről számolnak be.

Az öregítés hőmérsékletének növelésével a keményedés jellege kezdetben változatlan, 70 °C táján azonban eltűnik a plató és a lineáris szakaszt gyors növekedés váltja fel (Asano és Hirano 1968/a.). A szerzőknek az a nézete, hogy a zónaképződés 2 at % Zn—1 at % Mg összetételű ötvözetükben egészen 270 °C-ig le tud játszódni, de már 100 °C körül is csak kevés zóna képződik, és a magas hőmérsékleten keletkezett zónák nem növelik a keménységet. Természetesen itt a zónaképződéssel párhuzamosan η' is keletkezik. A szerzők egy másik dolgozatukban (Hirano és Asano 1970) arról számolnak be, hogyha szobahőmérsékletre végzett edzés után közvetlenül 100 °C-on 10 000 óráig öregítettek, 36 óráig nőtt a szobahőmérsékleti zónák mennyisége, ezután csökkent, miközben a kaloriméteres diagramon egy másik, szerintük η' -höz tartozó csúcs kezdett nőni. 474 óra után a zónáknak megfelelő csúcs teljesen eltűnt.

Hiranoékkal ellentétben Thomas és Nutting (1959—60) meglehetősen vitatható elektronmikroszkópi megfigyelései szerint az eredetileg 3—5 nm-es zónák, a mintát 160 °C-ra felmelegítve, kezdetben tovább nőnek, majd amikor elérik a 10 nm-es méretet, felbomlanak.

A zónák méretének időbeli változását szintén több szerző tanulmányozta magasabb hőmérsékleteken is. Mind Gerold és munkatársai (1970) röntgenszórás mérései, mind Lyman és Vander-Sande (1976), illetve Brofman és Judd (1978) elektronmikroszkópos vizsgálatai $r \sim t^{1/3}$ kinetikát mutattak. Ez arra utal, hogy a növekedést a térfogati diffúzió szabályozza (Lifshitz és Slyzov 1961, Wagner 1961).

Kawano és munkatársai (1970) azt tapasztalták 2,6 at % Zn, 1,3 at % Mg-tartalmú ötvözetükön, hogy a kisebb hőmérsékleteken maximálisan 2 nm-es zónaméret 120 °C felett erősen nő, 135 °C-on pedig kb. 10⁴ perc után — amikor a zónaméret 6 nm — egy hosszabb plató következik. Tomita és munkatársai (1979) egy hasonló változást a zónák jellegének a változásával hoztak kapcsolatba.

Magasabb hőmérsékleteken a zónák jellegének változását figyelték meg Graf (1956/a., b., 1957) Mondolfo és munkatársai (1956), Schmalzried és Gerold (1958),

valamint Gerold és Haberkorn (1959) is. Szerintük 100 °C környékén már nem az {100}, hanem az {111} síkokban épülnek fel a zónák, és szerkezetük rendezettséget mutat, amely idővel hasonló lesz a Zn₂Mg-éhez. Kelly és Nicholson (1963) véleménye az, hogy e kétféle zóna keletkezésére nincs bizonyíték. Ők a Graf által megfigyelt röntgenszórási képet η' kiválások képződésének tulajdonítják. Röntgen kisszögű szórás méréseivel 2 at% Zn—1,3 at% Mg ötvözetben 60 °C alatt egy, 60—100 °C között két különböző méretű, de teljesen koherens képződményt észlelt Ungár (1979/a., b.). E két típus közül a 60 °C alatt is képződő, kisebb átlagos átmérőjű fajta 100 °C környezetében már nem tud kialakulni, a nagyobb változat mérete azonban ilyen hőmérsékleteken erősen megnő és koegzisztál η' -vel. Zahra és munkatársai (1979), valamint Lendvai és munkatársai (1979) kaloriméteres vizsgálatai Ungáréval azonos összetételű mintákon hasonló eredményre vezettek. Dünkeloh és munkatársai (1974) pedig kisszögű röntgenszórás vizsgálataik alapján azt tapasztalták, hogy 20—60 °C között csak egyféle, a szobahőmérsékleti zónákra jellemző összetétele van a részecskének, 60 °C felett azonban mind a szobahőmérsékleti, mind az η' fázissal azonos összetételű zónák képződnek. Lyman és Vander-Sande (1976) Al-2 at% Zn-2 at% Mg ötvözetében 100 °C-on 5, 150 °C-on 2 perc hőkezelés után 2,5 nm átmérőjű részecskéket észlelt nagy felbontású elektronmikroszkópi módszerrel. Ezek az {111} síkokban képződtek, teljesen koherensek voltak a mátrixszal, és később átnőttek η' lemezkeibe. Hasonló megfigyelései vannak Brofmann és Juddnak (1978) is. Mondolfo (1971) a rendezett zóna — η' vitát definíció-kérdésnek minősítette. Mi a magunk részéről a teljesen koherens részecskéket GP zónáknak tekintjük, még akkor is, ha a szerkezete nagyon közel esik a részben koherens η' átmeneti fázis szerkezetéhez.

Meglehetősen különleges elképzelése van Ryumnak (1975) a magas hőmérsékleten képződő zónákról. Mérései szerint a keményedés 100 °C felett — amennyiben az edzést közvetlenül az öregítés hőmérsékletére végezte — csak hosszú inkubáció után indult, és idővel durva, a heterogén magképződésre jellemző eloszlású kiválásokhoz vezetett. Ha az edzés szobahőmérsékletre történt, itt legalább 5 s-ig tartózkodott a minta, és ezt követte a felhevítés, a keményedés azonnal megkezdődött, és végül homogén eloszlású, nagy diszperzitású, apró kiválásokot eredményezett. A keményedés mértéke 5 s felett független volt a szobahőmérsékleten tartózkodás idejétől.

Ryum a fentieket a következőképpen magyarázta: szobahőmérsékleten kétféle mag képződik. Az egyik itt tovább is tud nőni, és létrehozza a szobahőmérsékleti zónákat, amelyek 100 °C körül elbomlanak. A másik típushoz tartozó magok alacsony hőmérsékleten képtelenek nőni, de igen stabilak, és csak akkor kezdenek növekedni, mikor a szobahőmérsékleti típus már elbomlik. Ezek a zónák később η' -be alakulnak át. Ryumnak más kutatókkal (Bryant 1966, Murakami és munkatársai 1969) egybehangzó tapasztalata szerint az alacsony hőmérsékletű zónák nem érzékenyek a jelenlevő vakanciák mennyiségére, a magas hőmérsékletűek azonban igen. Lacom és munkatársai (1979), valamint Radomsky és munkatársai (1979) mérései alátámasztják Ryum megfigyeléseit.

Asano és munkatársai (1976) tapasztalatai Ryummal ellentétesek. Ők egy hasonló összetételű ötvözetnél közvetlenül az öregítés hőmérsékletére edzett mintákon ellenállásméréssel rövid idő alatt tetemes zónaképződést észleltek, amely független volt a vakanciák mennyiségétől. Inkubáció csak ott lépett fel, ahol a kiválások eloszlása heterogénná vált. Korábbi méréseinél pedig Asano és Hirano (1968/a.) megfigyelte, hogy mintegy 24 óráig a szobahőmérsékleti hevertetés fokozza a magas

hőmérsékletű zónaképződést, hosszabb hevertetési időkre azonban már valóban érzéketlen az ötvözet.

Az irodalmi adatokat összegezve az alábbi kérdések merülnek fel:

- milyen a zónák összetétele;
- van-e szerepük a zónaképződés kinetikájában a többletvakanciáknak;
- a zónaképződés során mikor, milyen atomok mozgása dominál;
- milyen a különböző jellemzők kinetikafüggvényeinek a jellege;
- különböző körülmények között mekkora a maximális zónaméret;
- hogyan változik a zónák jellege az öregítés hőmérsékletének növelésével;
- milyen kapcsolat van a magas hőmérsékletű zónák és η' képződése között.

3.2. A szobahőmérsékleten képződő zónák összetétele

A szobahőmérsékleten hosszú idő alatt (6 hét) képződő, tehát a metastabil egyensúlyi állapotban levő zónák összetételét a röntgen kisszögű szórás integrális intenzitásából Geroldnak az irodalmi összefoglalóban ismertetett módszerének felhasználásával határoztuk meg.

Látható a 3.1. ábrából, hogy a (3.1) kifejezés bal oldalán szereplő ún. redukált integrális intenzitás, mint a Zn átlagos koncentrációjának (x) a függvénye, a \times és o jelű mérési eredményekre a mérési hibán belül leírható egy egyenessel. A megfelelő ötvözetekre tehát metastabil egyensúlyban a zónákban, illetve a mátrixban a Zn-koncentráció azonos. A legkisebb négyzetek módszerével a mérési pontokból

$$x_1 = 0,74 \text{ at\%} \quad x_2 = 42,2 \text{ at\%}$$

adódik. Megfontolásaink helyességét alátámasztja, hogy a 11. jelű 0,72 at% Zn-, 1,11 at% Mg-tartalmú ötvözetben nem észleltünk zónaképződést, ugyanakkor az 1,01 at% Zn-, 0,6 at% Mg-tartalmú 8. ötvözetben igen.

Fenti eredményünk egyben azt is mutatja, hogy az adott koncentráció-tartományban a Zn mennyisége egyértelműen meghatározza metastabil egyensúlyban a zónák mennyiségét. Térfogati hányaduk a fenti adatokból

$$f = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = 2,4x - 1,8 \quad (3.2)$$

kell legyen, ahol x at%-ban helyettesítendő be. A zónáknak (3.2) alapján számított térfogati hányadát a II. táblázat tartalmazza.

(3.2) egyezik Kikuchi és munkatársai (1977) eredményével, amelynek értelmében a zónák térfogati hányada metastabil egyensúlyban nő az ötvözet Zn-koncentrációjával.

A 3.1. ábrán az egyenesre nem illeszthető nagy Zn/Mg arányt tartalmazó 16. és 17. ötvözetre később vissza fogunk térni.

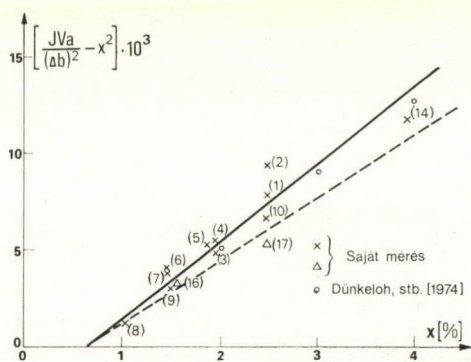
A zónák Mg-koncentrációja a következő megfontolás alapján határozható meg: mindazokra az ötvözetekre, amelyeknek a zónáiban, valamint a maradék mátrixában a magnéziumkoncentráció azonos, (3.2)-höz hasonlóan fenn kell álljon az

$$f = \frac{y - y_1}{y_2 - y_1} \quad (3.3)$$

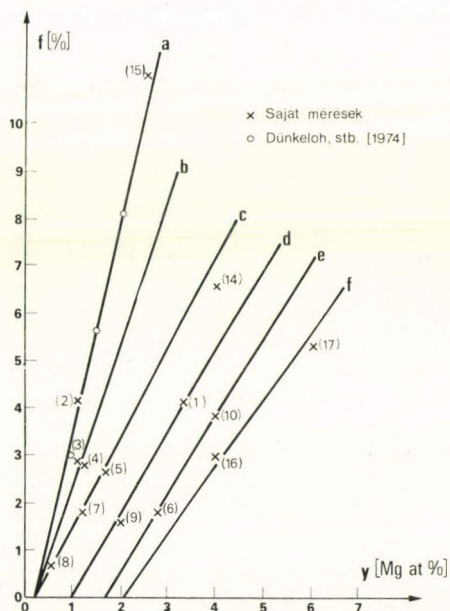
II. TÁBLÁZAT

A nagy tisztaságú ötvözetekben szobahőmérsékleti metastabil állapotban meghatározott adatok

Ötvö- zet	x	y	I	R_G	f	x_1	x_2	y_1	y_2	Q
	(at %)	(at %)	(10^{23} cm^{-3})	(nm)	(%)	(at %)		(at %)		(J/g)
1.	2,5	3,3	1,26	1,3	4,15	0,74	42,2	0,91	57,3	12,3
2.	2,5	1,1	1,53	1,5	4,15			0,27	20,5	10,1
3.	2,0	1,1	0,81	1,0	2,88			0,27	29,9	7,8
4.	1,9	1,1	0,89	1,1	2,76			0,27	29,2	7,5
5.	1,9	1,7	0,86	1,3	2,66			0,27	50,0	8,0
6.	1,5	2,8	0,63	1,3	1,75			1,77	57,8	6,1
7.	1,5	1,2	0,66	1,5	1,75			0,27	50,0	5,6
8.	1,0	0,6	0,16	1,5	0,62			0,27	50,0	1,1
9.	1,5	2,0	0,47	1,0	1,83			0,91	57,3	
10.	2,5	4,0	1,07	1,0	4,43			1,77	57,8	
11.	0,7	1,1	—	—	—	↓	↓			
14.	4,0	3,9	1,76	1,2	7,86			0,27	50,0	
15.	5,0	2,4	3,17	1,4	10,3			0,27	20,5	
16.	1,5	3,9	0,49	1,1	?			?	?	
17.	2,5	6,0	0,87	1,1	?			?	?	



3.1. ábra. A röntgen kisszögű szórás redukált integrális intenzitása az ötvözet átlagos Zn-koncentrációjának a függvényében

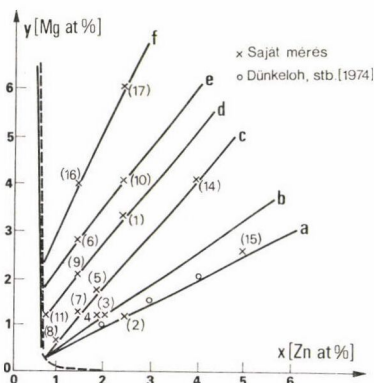


3.2. ábra

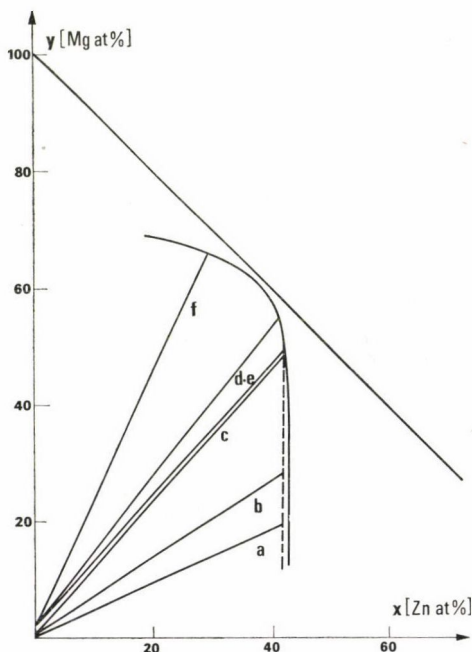
összefüggés is. A (3.2) alapján számított térfogati hányadot a magnéziumkoncentráció függvényében a 3.2. ábra mutatja. Látható innen, hogy az **a**, illetve **c** egyeneseken fekvő ötvözetek minden bizonnyal egy-egy konódára esnek. A legkisebb négyzetek módszere mindkettőből $y_1=0,27$ at %-ot ad az oldatban maradó magnézium koncentrációjára. Ennek alapján rajzoltuk be a 3.3. ábrán a metastabil fázisdiagramba az **a** és **c** konódát. Nyilvánvalóan a két konóda közé eső ötvözetek mindegyike egy-egy olyan újabb konóda mentén fekszik, amelyik keresztül megy **a** és **c** metszéspontján (lásd pl. a 3. és 4. ötvözethez tartozó **b** konódát). Az ezekben képződő zónáknak a magnézium-koncentrációja a megfelelő konódák meredekségéből, vagy a (3.3) kifejezés alapján, figyelembe véve az $y_1=0,27$ at % értéket, számítás-sal meghatározható.

Be tudjuk határolni a konódák meredekségét a 3.1. ábra kihúzott egyenesére eső többi ötvözetre is. Egyrészt ugyanis a zónák Mg-koncentrációjának — így a megfelelő konóda meredekségének — a Mg/Zn aránnyal növekednie kell, másrészt viszont a zónák magnézium-koncentrációja $y_2 \leq 57,8\%$ kell legyen az $x_2=42,2\%$ következtében. Ilyen becslés alapján készítettük az 1., illetve 6. ötvözet mellé a 9., illetve 10. ötvözeteket. Mivel a mért integrális intenzitásokból meghatározott **f** értékek jól egyeztek a becslésből adódóakkal, metastabil fázisdiagramunkba a **d** és **e** konódákat is berajzolhatjuk.

A már meghatározott konódákból extrapolációval megszerkeszthetjük a fázisdiagramnak a nagy ötvözőkoncentrációkhoz tartozó részét is. Ezt mutatja a 3.4. ábra.



3.3. ábra. A szobahőmérsékleti metastabil fázisdiagram alumíniumban gazdag sarka az AlZnMg ötvözetrendszerben



3.4. ábra. Az AlZnMg ötvözetrendszer szobahőmérsékleti metastabil fázisdiagramja az általunk meghatározott konódákkal

Nyilvánvaló, hogyha az ötvözetben a Mg/Zn arány az e konódához tartozó érték fölé nő, a zónák Zn -koncentrációjának egyre inkább csökkennie kell. Erre utal a 3.1. ábrán az ilyen típusú ötvözetekhez (16., 17.) húzott szaggatott egyenes meredeksége is. Mivel ezek az ötvözetek kiestek az érdeklődési területünkől, a fázis-diagramnak ezzel a tartományával nem foglalkoztunk részletesen.

Az ötvözőknek a fentiek alapján a metastabil egyensúlyi állapotra meghatározott koncentrációit a II. táblázatban szintén feltüntettük. Az f konóda esetében nincs semmi megbízható adatunk sem a meredekségnek, sem a koncentrációknak a megbecsüléséhez. Az egyetlen valószínűnek látszó adat a 3.1. ábra alapján, hogy $x_1 \approx 0,74$ at %.

Látható a II. táblázatból, hogy a zónáknak alumíniumot is kell tartalmazniuk, mégpedig annál nagyobb mértékben, minél kisebb az ötvözetben a Mg/Zn arány. Feltehető, hogy a nagy Mg/Zn arányoknál sem válnak a zónák teljesen alumíniummentessé, így az 1. és 9., valamint a 6. és 10. számú ötvözetnél y_2 -t felülbecsültük, és a 3.4. ábrán a felső keveredési határ már kisebb Mg -koncentrációknál elhajlik.

A II. táblázat a szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyban levő zónák Guinier-sugarát is tartalmazza. Ungár (1979/c.) a röntgen kisszögű szórás intenzitás-eloszlásának analizéséből azt is megállapította, hogy a részecskék jó közelítéssel gömböknek tekinthetők, amelynek így a valódi sugara az

$$R = \sqrt[3]{5/3} R_G \approx 1,29 R_G \quad (3.4)$$

kifejezés alapján meghatározható.

3.3. A zónaképződés kinetikája szobahőmérsékleten

A zónaképződés kinetikáját röntgen kisszögű szórásvizsgálatokkal, a fajlagos ellenállás mérésével, valamint az ellenállás és termofeszültség egyidejű méréséből meghatározott Nordheim—Gorther-diagramok alapján tanulmányoztuk. A röntgen kisszögű szórás integrális intenzitása a Zn -atomok helyzetére érzékeny, az ellenállás pedig mind a szilárdoldatban, mind a zónákban függ a Mg -koncentrációtól is. A Nordheim—Gorther-diagram azt mutatja, milyen atomok, illetve komplexek mozgása dominál a képződés folyamatában.

Mérési eredményeink értékeléséhez feltételeztük, hogy a zónába beépült Zn relatív mennyisége (beépült/beépülni képes) a megfelelő integrális intenzitások hányadosával (J/J_∞) arányos, és a tapasztalatnak megfelelően leírható az Avrami-egyenletből (Avrami 1939, 1940, 1941) adódó kifejezés általánosított alakjával (Christian 1975. 540. old.):

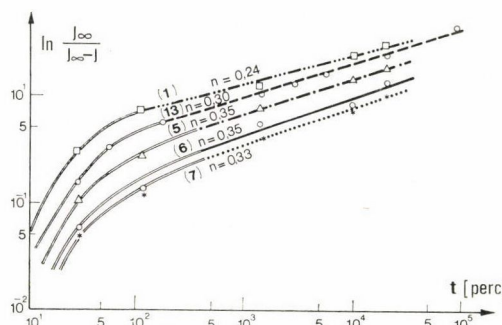
$$\frac{J_\infty - J}{J_\infty} = e^{-(Kt)^n}, \quad (3.5)$$

ahol a reakció K sebességállandója Arrhenius-típusú kifejezése a hőmérsékletnek, n pedig a reakció rendjére jellemző szám. n meghatározására (3.5)-nek

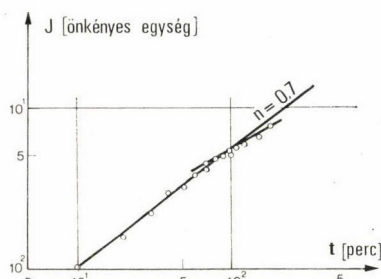
$$\ln \ln \frac{J_\infty}{J_\infty - J} = n \ln K + n \ln t \quad (3.6)$$

alakját fogjuk használni.

A 3.5. ábra néhány nagy tisztaságú ötvözet kinetikáját mutatja a (3.6)-nak megfelelő ábrázolásban. J_{∞} -nek itt a 4 hónapos hevertetés után mért J értéket tekintettük. Az egyes függvényeknél feltüntettük az egyenes szakasz iránytangenséből meghatározott n értéket is. Látható, hogy a kinetika minden esetben egy kezdeti, gyorsan emelkedő szakasszal kezdődik, amely több óra alatt éri el a lineáris tartományt. A kezdeti szakaszban a zónaképződés annál gyorsabb, minél nagyobb az ötvözet Zn-tartalma. A lineáris szakaszban ezzel szemben úgy tűnik, hogy a meredekség alig függ a Zn-koncentrációtól.



3.5. ábra. A nagy tisztaságú 1., 5., 6., 7., 13. ötvözetek integrális intenzitásának változása szobahőmérsékleten Avrami-típusú ábrázolásban.

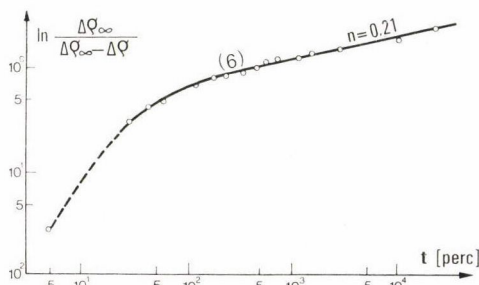


3.6. ábra. Az integrális intenzitás kezdeti változása a 6. ötvözetben szobahőmérsékleten végzett in situ mérés alapján

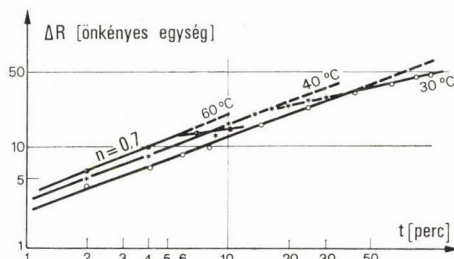
A kezdeti szakasz részletes tanulmányozására in situ integrális intenzitásméréseket végeztünk. Ennek eredményét mutatja a 6. ötvözetre a 3.6. ábra. Mivel a nukleációs folyamat végállapotát nem tudjuk meghatározni, de t ebben a periódusban még elég kicsi, (3.5) helyett az

$$J \approx J_0(Kt)^n \quad (3.7)$$

közelítést használtuk az ábra megszerkesztéséhez. Mint látható, kezdetben $\ln J$ ugyancsak lineárisan változik $\ln t$ -vel és ebben a szakaszban $n=0,7 \pm 0,1$.



3.7. ábra. A 6. ötvözet fajlagos ellenállásának változása szobahőmérsékleti öregítés során Avrami-típusú ábrázolásban.



3.8. ábra. A 6. ötvözet fajlagos ellenállásának kezdeti változása különböző hőmérsékleteken végzett in situ mérések alapján

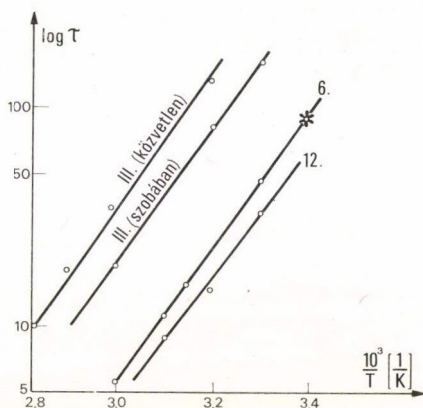
Az integrális intenzitáshoz hasonló jelleget mutat Avrami-típusú ábrázolásban a fajlagos ellenállás növekménye is, amit a 3.7. ábrán mutatunk be a 6. ötvözetre. A lineáris szakaszra ebből $n=0,21$ kitevő adódott.

Ugyancsak a 6. ötvözetben történtek azok a 30–60 °C között végzett in situ ellenállásmérések is, amelyeknek az eredménye a 3.8. ábrán látható. Mint megállapítható, a $\log R - \log t$ összefüggés kezdetben szintén lineáris, később azonban lelassul a folyamat. A lineáris szakasz befejeződésének idejéből és a nemesítés hőmérsékletéből Arrhenius-egyenes szerkeszthető. A 3.9. ábra a 6., 13. és III. ötvözetben mért eredményeket mutatja. Az utóbbin a mérésnek szobahőmérsékletre, illetve közvetlenül az öregítés hőmérsékletére végzett edzés után is elvégeztük. Az egyenesek az összetételről és az edzési körülményektől függetlenül párhuzamosak, és $0,62 \pm 0,02$ eV aktiválási energia adódik belőlük. A röntgen kiszcögű szórásból a 3.6. ábra alapján meghatározott pont szintén illeszkedik a 6. ötvözet Arrhenius-egyeneséhez.

A 3.9. ábrából az is látható, hogy nagyobb Zn-tartalom gyorsítja a kezdeti folyamatot. A szennyezők ezzel szemben lassító hatásúak. Még lassúbb a kezdeti szakasz, ha az edzés közvetlenül az öregítés hőmérsékletére történik. Mindkettő a vakanciák jelentős szerepére utal. Ezt alátámasztja, hogy az 530 °C-ról edzett mintáinkban lényegesen gyorsabban játszódott le a kezdeti folyamat, mint ha az edzés 470 °C-ról történt.

A zónaképződés kezdeti szakaszában (30–100 percig) az ellenállás és az integrális intenzitás közel azonos módon változik. Ez azt mutatja, hogy mind a Zn-, mind a Mg-atomok mozognak. *Panseri* és *Federighi* (1963) kimutatta, hogy már 0,1% Mg jelenléte elegendő ahhoz, hogy a Zn mozgására jellemző 0,4 eV aktiválási energiát 0,6 eV-ra emelje. Hasonló eredményre jutott *Ceresara* és *Fiorini* (1972) is. A 0,6 eV érték véleményünk szerint annak a következménye, hogy főként a Mg aktiválási energiája határozza meg az első kinetikaszakasz sebességét. A mi méréseink ezt a megállapítást alátámasztják.

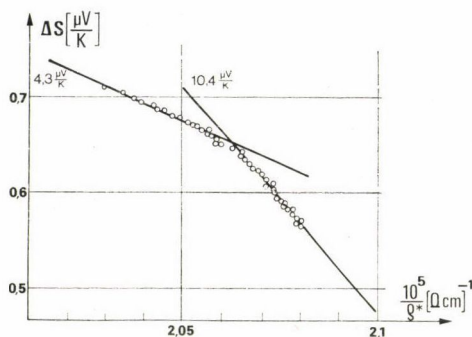
A Zn-koncentráció befolyása a nukleációs folyamatra csak úgy magyarázható, hogy már az edzés alatt, vagy közvetlenül edzés után Zn-tartalmú kis atomcsoportok (cluster) alakulnak ki az ötvözetben, és ezek válnak a zónák nukleációs helyeivé. Egy elképzelhető mechanizmus a magképződésre a következő: a Zn +4%-os és a Mg +14%-os méreteltérése miatt a szilárd oldatból már az edzés alatt, vagy azt követően a Zn-atomok nagy valószínűséggel a Mg atomok szomszédságában helyezkednek el. Ezt alátámasztja, hogy a különböző összetételű AlZnMg mintákon edzés után mért mikrokeménység koncentráció-függése csak úgy értelmezhető, ha feltételezzük, hogy a Mg-atomokat négy Zn-atom veszi körül (*Juhász és munkatársai* 1980). A zónák magjait valószínűleg ezek a csoportok képezik, amelyeknek a növekedési



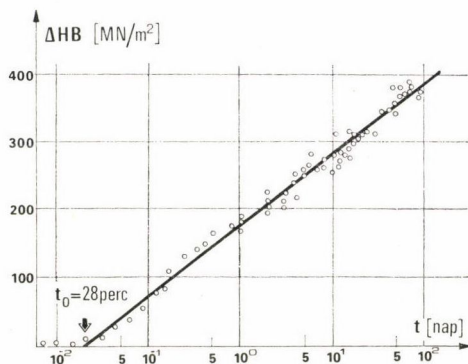
3.9. ábra. Az ellenállás kinetika első szakaszának időtartamából szerkesztett Arrhenius-egyenesek a 6. és 13., valamint a közvetve, illetve közvetlenül edezett III. ötvözetre. A ★-gal jelölt pontot az integrális intenzitás változása alapján határoztuk meg

sebességét a Mg-atomok beépülése szabályozza. A modellt alátámasztja az is, hogy Auger és munkatársai (1978) is megfigyeltek neutronszórással az edzés után rövid átmeneti ideig ilyen atomcsoportok kialakulását, és a zónák kialakulásával az atomcsoportok megszűntek.

A 3.10. ábra a 6. ötvözetnek szobahőmérsékleten mért Nordheim—Gorther diagramját mutatja. q^* a fajlagos ellenállásban az oldott ötvöző atomok járulékát jelöli (lásd 1. fejezetet). A diagram két egyenes szakaszból tevődik össze. Az $1/q^* \rightarrow 0$ esetre extrapolált ΔS érték az első egyenes szakaszból $+4,3 \pm 1 \mu\text{V/K}$ -nak adódik. Huebner (1968), illetve Rybka és Bourassa (1973) adatai szerint az extrapolált érték kétalkotós AlZn ötvözet esetén $\Delta S_{\text{Zn}} = 5,7 \mu\text{V/K}$, AlMg ötvözetre pedig $\Delta S_{\text{Mg}} = +2,1 \mu\text{V/K}$.



3.10. ábra. A 30 °C-on öregített 6. ötvözet Nordheim—Gorther diagramja



3.11. ábra. A 6. ötvözet keményedési kinetikája szobahőmérsékleten

Az eljárás többkomponensű ötvözetekre is alkalmazható, amennyiben egy adott periódusban csak egy komponens koncentrációváltozása jellemző a folyamatra. Mint eredményünkéből látható, az első egyenes szakaszban a Zn-atomok mozgása dominál az öregedésben. Ez tehát Suzuki és munkatársai (1972/a.) és Naess (1969) megfigyelését támasztja alá. Megjegyezzük itt, hogy a 3.10. diagram felvételekor az első mérés 30 perc után történt, a fentebb említett kezdeti, gyors változást tehát ez nem mutatja.

A diagram második lineáris szakaszára a tengelymetszet $10,4 \pm 1 \mu\text{V/K}$. Ez a nagy érték egyik ötvözőhöz sem rendelhető hozzá. Feltehetőleg ilyenkor $\text{Zn} + \text{Mg}$, vagy $\text{Zn} + \text{Mg} + \text{vakancia}$ komplexek mozgásával játszódik le az öregedés.

A két egyenes szakasz metszéspontjához tartozó öregítési idő erősen függ az edzés sebességétől, a 6. ötvözetnél pl. 8—15 óra között változott. Ez azt mutatja, hogy még a második szakaszban is szerepük van a többletvakanciáknak.

A harmadik szakaszban az irodalommal egybehangzóan vakanciahatást nem észleltünk. Itt mind az integrális intenzitás, mind az ellenállás Avrami-ábrázolásban lineárisan változik, az előbbi $n_I \approx 0,33$, az utóbbi $n_Q = 0,21$ meredekséggel. Ez azt jelenti, hogy $\Delta R \sim \Delta I^{2/3}$. Az arányosság arra enged következtetni, hogy a folyamatnak ebben a szakaszában már a végleges összetételű zónák növekedése megy végbe.

Megvizsgáltuk a 6. ötvözetre szobahőmérsékleten a keményedés kinetikáját is

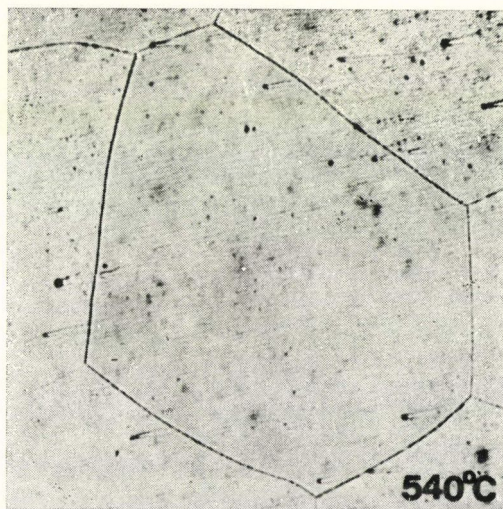
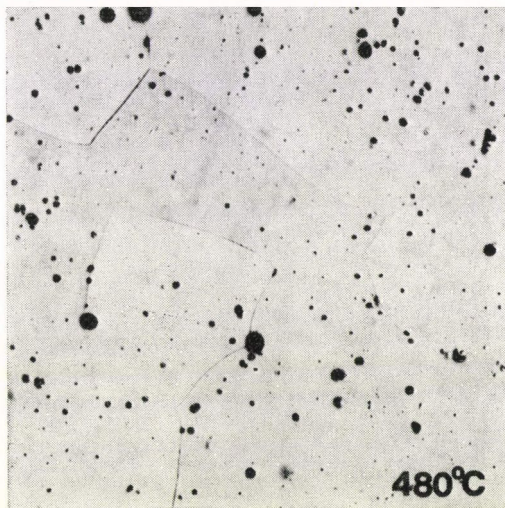
(3.11. ábra). Ez inkubációval indul, majd $\log t$ függvényében egyetlen egyenessel írható le. Az inkubációs idő közelítőleg egybeesik az említett első, gyors szakasz időtartamával. A lineáris jellegre eddig még nem sikerült kielégítő magyarázatot adni, bár azt többen megfigyelték (lásd 3.1. szakaszt).

3.4. A szennyezők hatása a zónaképződésre

A szennyezők hatásának a tisztázásához külön-külön vizsgáltuk nagy tisztaságú ötvözőkből készült mintákon a szilícium és a vas befolyását a zónaképződésekre, és végeztünk méréseket a technikai tisztaságú III. ötvözetben is. A nagy tisztaságú mintákban a Zn- és Mg-koncentráció az 5. és 6. ötvözetekkel volt azonos, a Si, illetve Fe mennyisége pedig kb. 0–0,4 t% (0–0,2 at% Fe, 0–0,4 at% Si) között változott. Ez magában foglalja a technikai tisztaságú ötvözetek szokásos szennyezőkoncentrációit.

A szilícium — az elektronsugaras mikroanalízis vizsgálatok szerint a dermedés során nagyságrendben $10\ \mu\text{m}$ méretekkkel rendelkező, durva, Mg_xSi_y összetételű kiválásokat képez. Ezek csökkentik az öregítéshez rendelkezésre álló ötvözők mennyiségét. Különösen erőteljes a csökkentő hatás a lassan dermedett tuskóknál. Az üzemi körülmények között készült tuskók ide tartoznak.

Metallográfiai vizsgálataink (3.12. ábra) azt mutatják, hogy a Mg_xSi_y kiválások a szokásos 470–480 °C-os oldó hőkezelés folyamán nem oldódnak fel teljesen. A hőmérsékletet növelve azonban az ötvözők oldódása egyre tökéletesebb lesz. Ezt alátámasztják a különböző hőmérsékletekről edzett minták fajlagos ellenállásértékei is. A fentieknek az az eredménye, hogy — amint azt a 3.13. ábráról megállapíthatjuk — a 480 °C-on végzett oldó hőkezelés után a Si-tartalmú minták öregedése szobahőmérsékleten még elmarad a terner ötvözetétől, egyre magasabb hőmérsék-

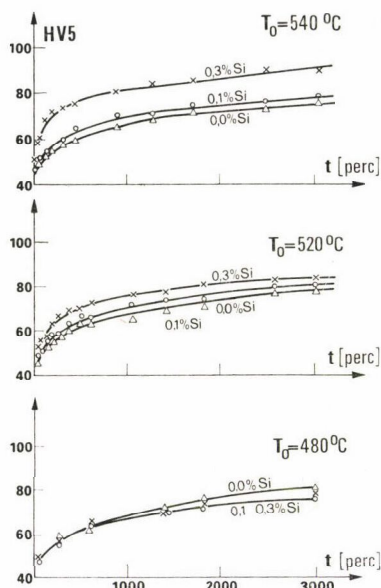


3.12. ábra. 480 °C és 540 °C-on 2 órás oldóhőkezelésnek alávetett minták metallográfiai felvétele

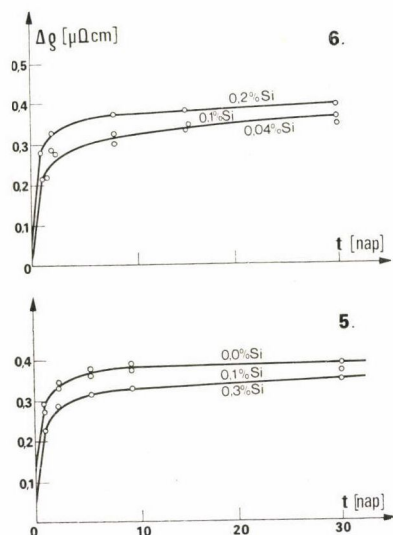
leteken homogenizált mintákban azonban egyre jobban érvényesül a Si kedvező hatása a keményedésre.

A fentieket alátámasztják a 3.14. ábrán bemutatott fajlagos ellenállásmérési eredmények is. Látható, hogy a Si hatásosabb a többlet Mg-ot tartalmazó 6. típusú ötvözetnél, mint a $\text{Zn:Mg} \approx 1:1$ összetételű 5. típusúnál.

A homogenizálás hőmérsékletének növekedésével erősödő, előnyös Si-hatás nyilvánvalóan azzal függ össze, hogy a ZnMg-típusú zónákkal párhuzamosan MgSi-típusú zónák is képződnek. Amikor az oldó hőkezelés hőmérséklete alacsony, a primer Mg_xSi_y kiválások lecsökkentik a túltelítettség mértékét a mátrixban, ezért ilyenkor kevesebb ZnMg és MgSi típusú zóna képződik. A ZnMg típusú zónaképződés igényéhez képest Mg-felesleget tartalmazó 6. típusú ötvözetnél a MgSi zónák párhuzamos képződésének köszönhető, hogy a Si-tartalmú minták ellenállás és keménység növekedése meghaladja az alapötvözetét. Valószínűleg az adalékolt 5. ötvözetekben is képződnek MgSi zónák, de kevesebb, mint a 6. típusúban, így hatásuk nem tudja kompenzálni a ZnMg zónák mennyiségének a csökkenését.



3.13. ábra. A különböző Si-tartalmú 5. típusú ötvözetek keményedése 480, 520, illetve 540 °C-on végzett homogenizálást követő 25 °C-os öregítés folyamán



3.14. ábra. Az 5., illetve 6. típusú, különböző Si-tartalmú ötvözetek ellenállásváltozása szobahőmérsékleten, 480 °C-on végzett oldóhőkezelés után

A 6. típusú ötvözeteken végzett Nordheim—Gortner-analízis azt mutatja, hogy a Si adalék jelentősen, 2—3-szorosára is meg tudja növelni a zónaképződési kinetika első két szakaszának idejét.

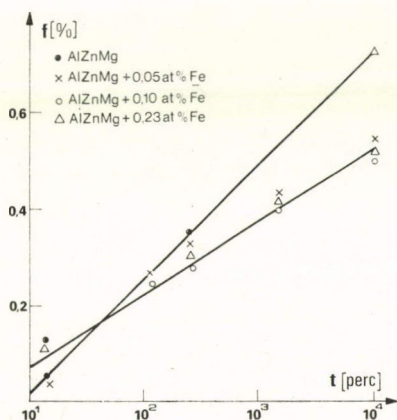
A vas ugyancsak leköti az ötvözők egy részét, elsősorban a Mg-ot, durva kiválások formájában. Megmutatkozott ez pl. röntgen kisszögű szórás méréseinknél: 0,05—0,23 at % Fe-at tartalmazó 6. típusú ötvözeinkben a zónák térfogati hányada

480 °C-on végzett oldó hőkezelés után a szobahőmérsékleti öregedés folyamán egy rövid, kezdeti szakasztól eltekintve, mindig alatta maradt a vasmentes ötvözetnek (lásd 3.15. ábra).

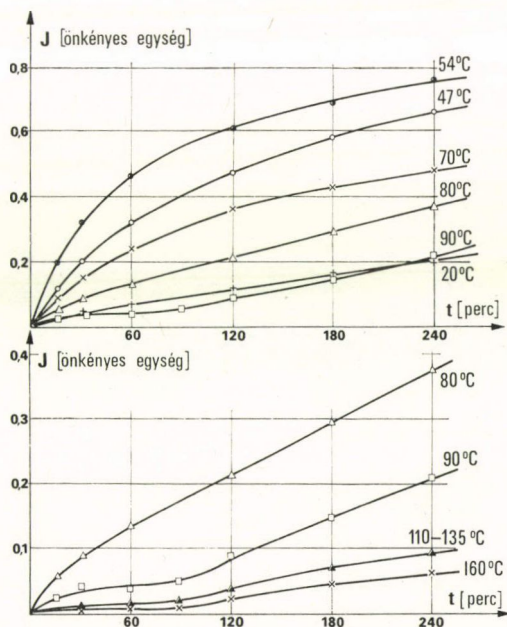
Befolyásolja a vas az öregedés kinetikáját is. 0,23 at % Fe jelenlétében a keményedési kinetika jellege és meredeksége ugyan azonosnak adódott azzal, amit a nagy tisztaságú ötvözetre a 3.2. ábrán bemutatunk, az inkubációs idő azonban 28 percről 19 percre csökkent. A Nordheim—Gorther-diagram töréspontjának helyzete azt mutatja, hogy ugyanennyi vas a kinetika második szakaszának az időtartamát is kb. a felére csökkenti.

A vas tehát — valószínűleg az ötvözők egy részének lekötése következtében — hátrányos a zónaképződés szempontjából. Ugyanakkor gyorsítja és lerövidíti a kinetika kezdeti periódusait, és ennek mértéke 0,05 at % fölött függetlennek adódott a vas koncentrációjától. Mivel a vas oldhatósága 480 °C-on kisebb 0,004 at %-nál, valószínű, hogy csak oldott atomjai befolyásolják a zónaképződés kezdeti szakaszát.

A két szennyező együttes hatásának tárgyalásakor figyelembe kell venni, hogy magas hőmérsékleten oldódó kiválások alkotnak egymással az alumíniumban. Így kevesebb ötvözőt kötnek le, illetve kevesebb maradhat — elsősorban a szilíciumból — oldatban, mint amikor külön-külön vannak jelen az AlZnMg ötvözetekben. Ezt támasztja alá, hogy hosszú, 10^4 perc nagyságrendű szobahőmérsékleti hevertetések után a III. és 6. ötvözetek ellenállás-kinetikái együtt haladtak.



3.15. ábra. Az integrális intenzitás változása a különböző Fe-tartalmú 6. típusú ötvözetben a szobahőmérsékleti öregítés idejének a függvényében



3.16. ábra. A III. ötvözetnél az integrális intenzitás változása szobahőmérsékletre végzett edzést egy percen belül követő 20–160 °C között történt öregítés során

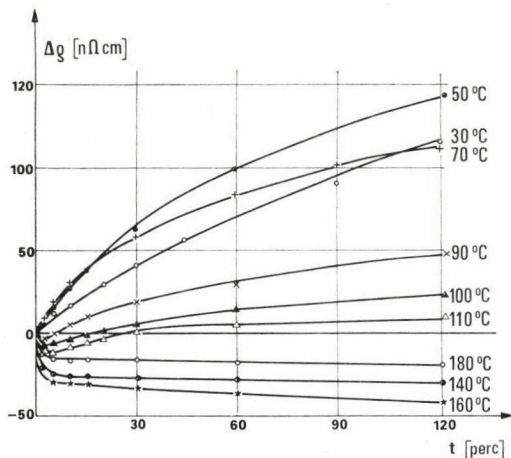
A kezdeti szakaszban azonban a szennyezők lassítják a zónaképződést. Látható a 3.9. ábrából, hogy az első, lineáris szakasz időtartama lényegesen hosszabb a technikai tisztaságú ötvözetekben. Ugyanakkor az aktiválási energia értéke változatlan. Hasonlóképpen megnő a szennyezők hatására a második, átmeneti szakasz időtartama is, bár ez a növekedés kisebb, mint mikor ugyanannyi Si szennyező egyedül van jelen. Valószínűleg mégis a Si lassító hatása érvényesül, és ezt csak részben kompenzálja, hogy az oldott vasatomok gyorsítják a kezdeti zónaképződést.

3.5. Zónaképződés szobahőmérséklet felett

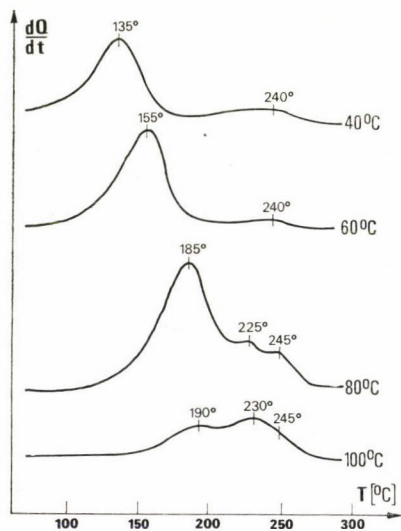
A zónaképződést magasabb hőmérsékleteken csak technikai tisztaságú ötvözeteken tanulmányoztuk. A 3.16. ábra az in situ méréssel kapott integrális intenzitás, a 3.17. ábra pedig a fajlagos ellenállás változását mutatja a III. ötvözetben szobahőmérséklet és 160 °C között különböző hőmérsékleteken végrehajtott öregítés során. Az ellenállás mérésénél a szobahőmérsékletre végzett edzést 1 percen belül követte a felfűtés. Látható az ábrából, hogy a kinetikafüggvények jellege kb. 70 °C-ig nem változik. Ezt — mint a 3.3. szakaszban láttuk — alátámasztja a görbék Avrami-analízise is. A legtöbb zóna 50 °C környezetében képződik.

A 3.16. és 3.17. ábrából látható, hogy 80 °C környékén a kinetikák jellege egyre inkább megváltozik. Az ellenállás egy rövid, csökkenő szakasszal indul, és a görbéken, különösen az integrális intenzitásnál, markánsan jelentkező inflexiók több folyamat szuperpozíciójára utalnak. Amennyiben az edzést közvetlenül az öregítés hőmérsékletére végezzük, a fajlagos ellenálláskinetikák kezdeti csökkenése elmarad.

A kinetikafüggvények összetett jellege érthetővé válik a kaloriméterrel kapott eredmények alapján. A 3.18. ábrán edzés után egy percen belül az öregítés hőmérsék-



3.17. ábra: A III. ötvözet fajlagos ellenállásának változása szobahőmérsékletre végzett edzést egy percen belül követő 30–160 °C között történt öregítés során



3.18. ábra: A III. ötvözetben szobahőmérsékletre végzett edzést egy percen belül követő 40–100 °C között végzett 6 órás öregítés után mért DSC diagramok

letére hevített és ott 6—6 óráig hőkezelt III. ötvözet DSC diagramjait láthatjuk. Megfigyelhető, hogy a 240°C -nál jelentkező szennyező-effektustól eltekintve, 40 és 60°C -on végzett öregítés után csak egy csúcs jelentkezik a diagramon. Ennek csúcshőmérséklete az öregítés hőmérsékletével — részben a zónaösszetétel változása, részben az azonos öregítési idő alatt nagyobb hőmérsékleten nagyobb méretek kialakulása következtében — nő. 80°C -os öregítés után egy újabb DSC csúcs is megjelenik, 100°C -on pedig ez válik uralkodóvá. Hasonló eredményeket kaptunk a Zn_2Mg sztöchiometriai összetételnek megfelelő II. ötvözet vizsgálatakor is, csak itt 100°C -on lényegesen magasabb volt mindkét csúcs.

Ungár (1979/c.) a 13. ötvözetünkön kimutatta, hogy ebben a hőmérséklettartományban a röntgen kisszögű szórás eloszlása kétféle Guinier-sugárral rendelkező részecskék szuperpozíciójával írható le. Elektronmikroszkópos vizsgálatai szerint a magasabb hőmérsékleten fellépő típus is teljesen koherens. Ezek a részecskék minden valószínűség szerint megegyeznek azokkal az $\{111\}$ síkokban képződő, koherens η' -elődökkel, amelyeket Lyman és Vander-Sande (1976) figyelt meg. Erre utal az is, hogy a 13. ötvözetben sokkal erőteljesebb a képződés, mint a III.-ban.

A bemutatott eredmények egyértelműen bizonyítják, hogy az AlZnMg ötvözetekben kétféle GP-zóna létezik, egyik szobahőmérséklet környezetében (GP I.), a másik magas (80 — 140°C) hőmérsékleteken (GP II.). Az utóbbi összetétele valószínűleg közel áll az η' -éhez.

4. Zónák reverziója; újraöregedés

4.1. Irodalmi áttekintés

A reverzió jelenségét Gayler (1922) fedezte fel: az alacsony hőmérsékleten képződött GP-zónák magasabb, de a szilárd oldhatóság határa alá eső hőmérsékleteken elbomlanak, így a metastabil zónákból metastabil szilárdoldat képződik. AlZnMg ötvözeteken a reverziót már Graf (1956/a., b., 1957) észlelte. Megfigyelte, hogy a 2,9 at% Zn—3,3 at% Mg-tartalmú ötvözetében a szobahőmérsékleten képződő zónák diffúz röntgenszórása 175°C -on részben, 200°C -on 15 s alatt pedig gyakorlatilag teljesen megszűnik. Észlelt reverziót 100°C -on képződő zónák esetében is, de ez csak részleges volt, a 100°C -on 24 óráig öregített minták zónái pedig egyáltalán nem revertáltak. Ugyancsak nem volt teljes a reverzió a nagy Zn-tartalmú (3,8 at%) mintákban sem. A reverzióval mindig együtt járt az η' átmeneti fázis képződése.

Erősen lecsökkent a diffúz röntgenszórás intenzitása 150 — 200°C -on (Schmalzried és Gerold 1958) hosszú ideig szobahőmérsékleten, illetve 14 napig 50°C -on öregített Al-2,6 at% Zn-3,8 at% Mg mintáiban is, a reverzió azonban sohasem volt tökéletes. A szerzők szerint ugyanis az η' magjai ilyenkor már jelen vannak az ötvözetben. 135°C felett végzett öregítésnél már egyáltalán nem jött létre reverzió.

Megfigyelte a reverziót Asano és Hirano is (1968/a., Hirano és Asano 1970) 2 at% Zn—1 at% Mg ötvözetben. E szerzők a szobahőmérsékleten képződött zónákat tartalmazó mintákat kaloriméterben a zónákhoz tartozó csúcs felső határáig hevítették, majd gyorsan lehűtötték, azután azonnal újból elvégezték a mérést. Azt tapasztalták, hogy másodszor nem lépett fel a zónákhoz tartozó csúcs. Ugyancsak revertált Asanoék mintáiban a keménység is, és ezzel egyidőben megváltozott a min-

ták feszültség—deformáció görbéjének az alakja. Megfigyelésük szerint zavarta azonban a mérést a reverzió közben lejátszódó η' képződés. Hasonlóképpen reverziót észleltek *Kawano és munkatársai* (1970) is 2,7 at % Zn—1,3 at % Mg összetételű mintájukon.

Tökéletes reverzió esetén létezik egy olyan T_{GP} kritikus hőmérséklet, amely felett zónák nem tudnak képződni, illetve a meglevők felbomlanak. *Dehlinger és Knapp* (1952) megmutatta, hogy a részecskék méretétől és számától függő entrópiatag valóban képes olyan csökkenést okozni a szabadenergiában, hogy a zónák bizonyos hőmérséklet alatt stabilabbak, mint a szilárd oldat.

A fentiekből kitűnik, hogy a zónák reverziójával egyidőben mindig fellép η' képződése is. *Lorimer és Nicholson* (1966) tapasztalata szerint viszont erőteljesen függ a magas hőmérsékleten képződő kiválások diszperzitása és mérete attól, hogy milyen mértékű volt előzőleg a zónaképződés alacsony hőmérsékleten. Amikor pedig az edzést közvetlenül az öregítés hőmérsékletére végezték, egy kritikus hőmérséklet felett a diszperzitás szűk hőmérséklettartományon belül három nagyságrenddel lecsökkent, és heterogén eloszlású, durva kiválások keletkeztek. *Lorimerék* a jelenséget úgy magyarázták, hogy η' vagy „homogénen” (valójában csak homogén eloszlásban) a GP zónákon nukleálódik, vagy heterogén módon a diszlokációkon. Szerintük a váltás hőmérséklete a zónaképződés T_{GP} kritikus hőmérséklete. E szerzők nézete szerint, amennyiben a már zónákat tartalmazó ötvözet hőmérsékletét növeljük, a kis zónák bomlani kezdenek, az elegendően nagy méretű zónák azonban a diffúzió véges sebessége miatt T_{GP} fölött is fenn tudnak maradni egy ideig, és át tudnak alakulni η' kiválásokká.

Az η' nukleációjának fenti magyarázatára később részletesen visszatérünk. Itt most csak az a lényeges számunkra, hogy amennyiben ez a modell helyes, nem alakul ki az ötvözetben a felfűtés során szilárd oldat, tehát nincs teljes reverzió. Márpedig η' nukleációját több szerző a *Lorimer—Nicholson*-modell alapján tárgyalja (*Cornis és Day* 1969, *Kent* 1970). Ugyanakkor mások nem fogadják el ezt a nukleációs elméletet. *Asano és Hirano* (1968/a., b.) azért, mert kaloriméteres méréseiknél nem észleltek a zóna $\rightarrow \eta'$ átalakulásának megfelelő hőfelszabadulást és kétféle öregítés után is ki tudtak mutatni zónákat. *Kawano és munkatársai* (1970) pedig azt tapasztalták, hogy ötvözetüknél a röntgen kisszögű szórásban 115 °C fölött inkubáció lépett fel. Ők ezt a hőmérsékletet tekintették T_{GP} -nek, ugyanakkor a homogén—heterogén nukleáció határa elektronmikroszkópi vizsgálataik alapján 170 °C volt.

Amennyiben *Lorimerék* elméletének megfelelően átnövési mechanizmus van, tehát a reverzió nem tökéletes, azt a hőmérsékletet szokás a GP zónák kritikus hőmérsékletének tekinteni, amelyen az új — esetünkben az η' -fázis — már azonos valószínűséggel képződik, mint a zónák (*Polmear* 1957-58, 1958-59). Ezen alap-szik *Lorimer és Nicholson* (1966) T_{GP} -definíciója is.

AlZnMg ötvözeteken először *Polmear* (1957-58, 1958-59) határozta meg a keményedési görbék töréspontjából egy sor összetételre az utóbbi értelemben vett T_{GP} értékeket, és ebből megadott a GP zónákra egy „metastabil egyensúlyi diagramot”. Eszerint T_{GP} 100—135 °C közé esik a vizsgált 1,2—2,5 at % Zn, 0,1—6,5 at % Mg tartományban, és értéke akár a Zn, akár a Mg koncentrációit tartjuk állandónak, a másik komponens mennyiségének növelésével nő. Megállapította *Polmear* azt is, hogy a zónák szerkezete mindenhol hasonló kell legyen egymáshoz, mert a fázishatár egy folytonos felületet képez.

Meglehetősen közel esnek *Polmear* adataihoz *Cornish* és *Day* (1969), *Kawano* és *munkatársai* (1970), *Grove* és *Judd* (1973), *Dünkeloh* és *munkatársai* (1974), valamint *Ryum* (1975) eredményei, akik többségükben csak egy-egy ötvözetre határozták meg T_{GP} -t. Ezzel szemben *Lorimer* és *Nicholson* adata kb. 15 °C-kal alacsonyabb, mint amit *Polmear* a hasonló ötvözetre kapott, *Suzuki* és *munkatársai* (1972/d.) szolvusz-felülete pedig 30—35 °C-kal fekszik alatta *Polmear*énak.

Egyáltalán nem ért egyet *Lorimer* és *Nicholson* T_{GP} definíciójával *Asano* és *Hirano* (1968/b.). Ők azt állapították meg kaloriméterrel, hogy az η' részecskék mellett akkor is ki lehetett mutatni zónákat, ha az edzést a heterogén nukleáció határa fölé végezték. Szerintük a zónák, valamint η' és η oldódási hőmérséklete függ az öregítés hőmérsékletétől, zónákra ez széles tartományban 35 °C-kal magasabb, mint az öregítés hőmérséklete, és mindhárom oldódási hőmérséklet azonos maximális hőmérsékletre extrapolálható. Véleményünk szerint azonban a szerzők extrapolációja rendkívül bizonytalan.

Többen igyekeztek általános összefüggést találni az összetétel és a zónák stabilitása (T_{GP}) között. *Asano* és *Hirano* (1968/a.) szerint konstans Zn-tartalom mellett a stabilitás a Mg-tartalommal nő. *Suzuki* és *munkatársai* (1972/a., b.) a Zn-tartalom, illetve a Zn+Mg és Zn/Mg növelésével észleltek növekvő stabilitást. *Dünkeloh* és *munkatársai* (1974) azt állapították meg, hogy olyan AlZnMg ötvözetben, amelyben a Zn-tartalom kisebb 2 at%-nál, teljesen, amelyben nagyobb 4 at%-nál csak részlegesen revertálnak a szobahőmérsékleten képződött zónák. Amennyiben pedig az öregítés hőmérsékletének alkalmas megválasztásával bármilyen összetételű ötvözetben 2,1 nm-nél nagyobb méretű zónákat állítottak elő, azok egyáltalán nem revertáltak.

Asano és *Hirano* (1968/a.) azt tanulmányozta, hogyan függ a stabilitás az öregítés hőmérsékletétől. Növekvő hőmérséklettel növekvő stabilitást észleltek.

Jelentősen befolyásolni tudják T_{GP} értékét az ötvözet szennyezői is (*Suzuki* és *munkatársai* 1973, *Thackery* és *Thomas* 1971). Az utóbbi szerzők az Al két legfontosabb szennyezőjének, a Fe-nak és Si-nak a szerepére hívták fel a figyelmet. Véleményük szerint ez a szennyezőhatás lehet egyik oka az irodalomban található T_{GP} értékek nagy szórásának is.

Murakami és *munkatársai* (1969) a vakanciák szerepére mutattak rá. Megfigyelésük szerint az öregítést megelőző edzés sebességének a növelésével a reverzió sebessége nő.

A reverziót követő újraöregedéssel, gyakorlati fontossága ellenére, kevesen foglalkoztak. *Graf* (1956/b.) azt észlelte, hogy az újraöregedés szobahőmérsékleten lassúbb, mint az eredeti, de az elérhető maximális keménység nagyobb. A lelassulás szerinte a vakanciavesztéssel függhet össze. *Murakami* és *munkatársai* (1969) 175 °C-on 15 perces reverziós hőkezelésnek alávetett mintákat 80 °C-on újraöregítve eltérést észleltek az eredetileg 300 °C-ról, illetve 450 °C-ról edzett minták között. Nehéz azonban elképzelni, hogy az ötvözet a 15 perces 175 °C-os hőkezelés után még érezze az edzés hatását a vakanciatartalomra.

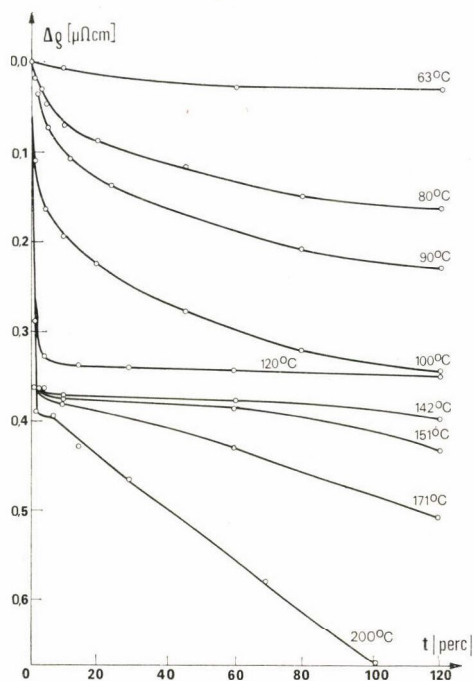
A fentiek alapján az irodalmi eredmények az alábbi fontosabb kérdéseket vetik fel:

- van-e, illetve milyen körülmények között van teljes reverzió az AlZnMg ötvözetekben;
- hol van a zónák kritikus hőmérséklete, és ezt milyen tényezők befolyásolják;
- hogy játszódik le az újraöregedés.

4.2. A szobahőmérsékleti zónák reverziója

A közepes szilárdságú ($<2,5$ at % Zn, <5 at % Mg) ötvözetek reverziós sajátosságainak jellegét főként technikai tisztaságú ötvözeteken tanulmányoztuk. A szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyba jutott zóna reverziós viselkedését a III. jelű ötvözetben mutatjuk be.

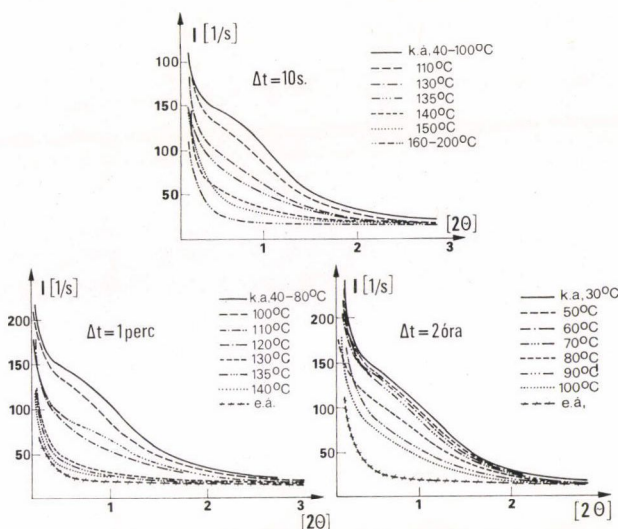
A 4.1. ábrán a fajlagos ellenállás változása látható különböző hőmérsékleten végzett revertáló hőkezelés során. 80°C környékén a fajlagos ellenállás erősen csökkenni kezd, 120°C felett pedig már rövid hőkezelés hatására egy vízszintes szakaszba megy át a kinetika. 140°C -nál magasabb hőmérsékleteken a vízszintes szakaszt egy percen belül eléri a fajlagos ellenállás, és értéke a szilárdoldat állapotának felel meg. Hosszabb idő után a hőmérséklettel növekvő mértékű újabb ellenálláscsökkenés következik be. A gyors esés a GP zónák ellenállás-járulékának a csökkenésével, illetve megszűnésével függ össze, míg a második, lassúbb csökkenés a valódi kiválások (η' , η) képződésének a következménye. Minthogy közben az állandó szakaszon a fajlagos ellenállás a szilárdoldatnak megfelelő értéket éri el, eredményünk a GP zónák teljes reverzióját igazolja.



4.1. ábra. A III. ötvözet fajlagos ellenállásának a változása a szobahőmérsékleten képződött zónák különböző hőmérsékleten lejátszódó reverziója folyamán

Alátámasztja a teljes reverziót a röntgen kisszögű szórás intenzitás-eloszlása is. Mint a 4.2. ábrából látható, 130°C felett az eloszlási karakterisztika jól megközelíti a szilárd oldat állapotban mért eloszlást. A hosszabb idő alatt, magasabb hőmérsékleteken, a kis szögek tartományában észlelhető intenzitás-növekedés már az η' részecskék képződésének a következménye. Ezeknél a méréseknél az integrális intenzitás változását, amely adott részecsketípus — pl. zónák — esetén a térfogati hányaddal arányos (Gerold 1966), a 4.3. ábrán láthatjuk. Mint megfigyelhető, a zónák mennyisége alacsonyabb hőmérsékleten csak kis mértékben, 80°C -tól azonban egyre erőteljesebben csökken az idővel, és 130°C felett a kiindulási 1,5%-kal szemben már 0,1%-nál kisebb, mindig közel azonos térfogati hányadnak megfelelő értéket eredményez.

Ugyanezt alátámasztják a folyáshatár mérések is (4.4. ábra). Észre kell azonban venni a 4.4. ábrán, hogy a folyáshatár minimuma a hőmérséklet növekedésével egyre csökken. Ennek értelmezésére még vissza fogunk térni.



4.2. ábra. A röntgen kisszögű szórás intenzitáselosztása a III. mintánál különböző hőmérsékleten végzett 10 s, 60 s, illetve 2 óra hosszú reverztáló hőkezelés után

Mind a térfogati hányad, mind a folyáshatár karakterisztikákon a magasabb hőmérsékleteken jelentkező felszálló ág az η' képződésének a következménye.

A 4.5. ábrán a röntgen kisszögű szórásból meghatározott átlagos zónatérfogatnak és sűrűségnek a változását mutatjuk be. 90 °C-on a zónasűrűség csak lassan csökken, az átlagos térfogat pedig kezdetben alig változik, majd nő. Mindez azt jelenti, hogy a kis zónák ezen a hőmérsékleten felbomlanak, tehát Ostwald-érés játszódik le. Ez a folyamat már alacsonyabb hőmérsékleten is bekövetkezik, de 80 °C alatt még nem vezet a GP zónák térfogati hányadának jelentős csökkenésére. Így ezeken a hőmérsékleteken a mechanikai jellemzőkben tapasztalt változások pusztán a zónák átrendeződésének a következményei.

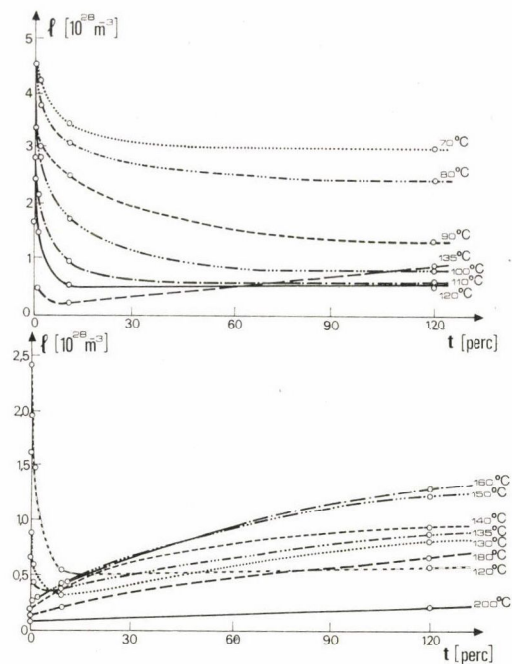
90 °C felett a hőmérsékletet növelve a 4.5. ábra alapján az Ostwald-érés hamarabb kezdődik (110 °C), még feljebb pedig nem is játszódik le (130 °C) felett). Itt az átlagos zónaméret növekedése csak a kis zónák felbomlásának az eredménye. GP zónák azonban még 110 °C felett is léteznek, de számuk a hőmérséklet növekedésével egyre csökken.

A fentiekből meggyőzően látszik, hogy az ötvözetben a GP zónák nem alakulnak át közvetlenül η' részecskékké, hanem előbb felbomlanak. Így az irodalomban általában elfogadott nemesedési sorrend (lásd 2. fejezetet) helyett a nemesedés valódi sorrendje:

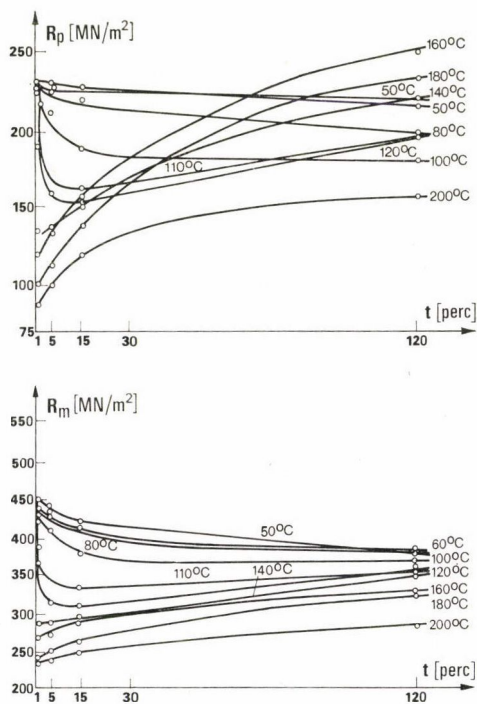
GP zóna \rightarrow szilárdoldat (GP zónára telítetlen, η' -re túltelített) $\rightarrow \eta'$.

Mindez azt jelenti, hogy az ötvözetben tökéletes a reverzió.

Ehhez a kérdéshez azonban néhány megjegyzést kell fűznünk: az előzőekből is kitűnik, de a 4.3. ábra adatainak a 4.6. ábrán bemutatott ábrázolásából még világosabban látszik, hogy a zónák bomlása és az η' képződése többnyire összefolyik.



4.3. ábra. A röntgen kisszögű szórásból mért térfogati hányad változása a szobahőmérsékleten nemesített III. mintánál a revertáló hőkezelés hőmérsékletének és idejének a függvényében



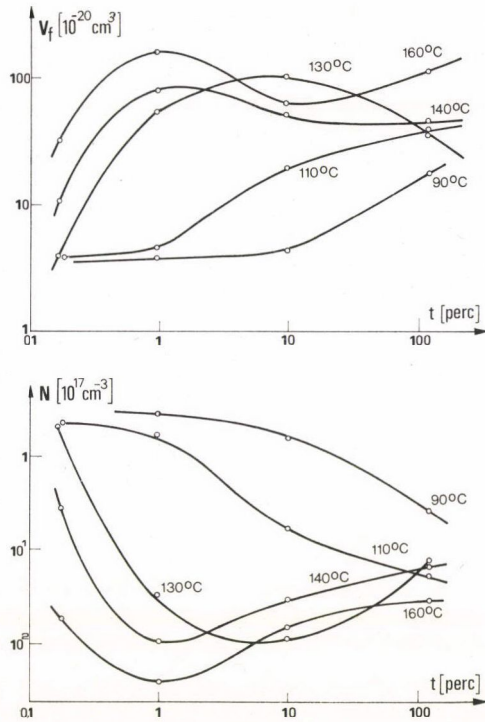
4.4. ábra. A szobahőmérsékleten öregített III. ötvözet folyáshatárának és szakítószilárdságának a változása a revertáló hőkezelés során

Az ábráról azt is megállapíthatjuk, hogy 10 s alatt még sehol nem játszódik le teljes reverzió, egy percen belül azonban már meglehetősen tökéletes a GP zónák bomlása. Ugyanakkor az η' képződésének a mértéke egy perc eltelte után még csekély. Éppen ezért az egy perc alatt lejátszódó bomlást tekintjük a továbbiakban reverziónak. A hozzá tartozó görbe extrapolációjából a III. ötvözet reverziós hőmérséklete kb. 135 °C.

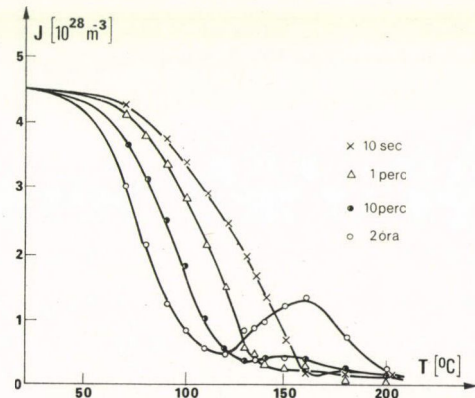
Valószínűleg elsősorban e rövid reverziós időnek tulajdoníthatók a korábbi irodalomban a teljes reverzió körül fellépett problémák.

A „tökéletes” reverzióhoz egy másik kérdés is kapcsolódik. Láttuk a 4.4. ábrán, hogy a folyáshatár minimuma a hőmérséklettel 135 °C fölött is erőteljesen csökken. A fajlagos ellenállásnál és az integrális intenzitásnál ez a csökkenés elhanyagolhatóan kicsi. Ebből arra következtethetünk, hogy bár a zónák felbomlanak, a bomlás csak 200 °C fölött eredményez tökéletesen rendezetlen szilárdoldatot. Alacsonyabb hőmérsékleteken a zóna helyén koncentráció-inhomogenitások maradnak fenn, amelyek a diszlokációkat még számottevően akadályozzák mozgásukban. Látni fogjuk a 6. fejezetben, hogy ezt az elképzelést az η' magképződése is alátámasztja.

Végeztünk reverziós vizsgálatokat szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyig nemesített állapotban a nagy tisztaságú ötvözetsorunk több tagján is. Az egy perces reverziós idő mindenhol reális választásnak bizonyult. A 4.7. ábrán az egy perces revertáló hőkezelések után mért integrális intenzitásokat mutatjuk be a hőkezelés hőmérsékletének függvényében. A görbék növekvő Zn-tartalom szerint rajzoltuk egymás fölé. Úgy tűnik, hogy a Mg-tartalom nem befolyásolja számottevően a reverziós hőmérsékleteket (lásd



4.5. ábra. A revertáló hőkezelés folyamán a részecskék átlagos térfogatának (V) és sűrűségének (N) a változása a III. ötvözetben

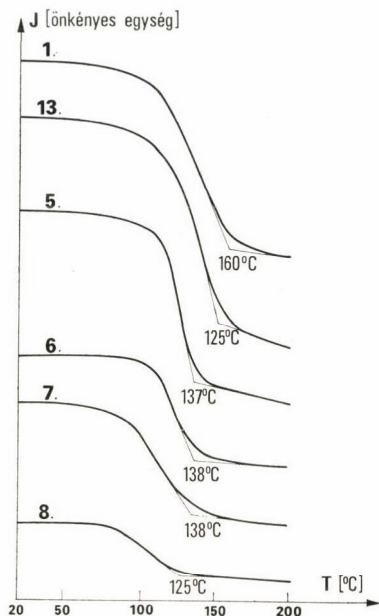


4.6. ábra. A különböző ideig tartó revertáló hőkezelés hatása az integrális intenzitásra a hőmérséklet függvényében

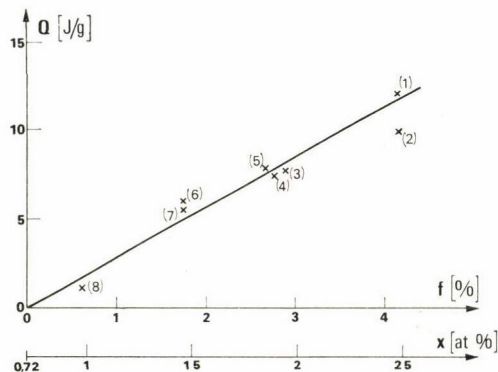
6. és 7. ötvözetet), a zónák stabilitását a Zn-tartalom szabja meg. Alátámasztja ezt Ungár és munkatársai (1979) munkája. Ők az itt közölt közös eredményeket nagyobb Zn-koncentrációk tartományára is kiterjesztették, és ennek alapján egy metastabil fázisdiagramot adtak meg a GP zónákra és az η' fázisra.

A cink meghatározó szerepére a zónák kötésében már az előző fejezetben is felhívtuk a figyelmet. Láttuk, hogy nem túl nagy Zn-tartalom esetén a metastabil egyensúlyban a térfogati hányadot kizárólag ez a komponens szabja meg. Méginkább alátámasztja ezt a zónák bomláshője. A 4.8. ábra a különböző összetételű ötvözeteknél a metastabil állapot reverziójánál fel-

szabaduló hőt ábrázolja a zónák térfogati hányadának a függvényében. Megfigyelhető, hogy a két mennyiség egymással arányos, és az egyenes iránytangenséből az egységnyi térfogati hányadra eső bomláshő



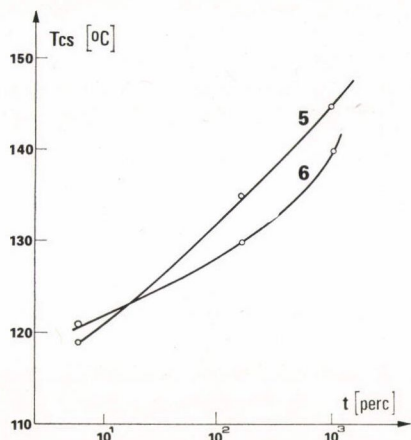
4.7. ábra. Különböző összetételű min-tákban egy perces reverzió után az integrális intenzitás változása a hőkezelés hőmérsékletének a függvényében és az ebből meghatározott reverziós hőmérsékletek



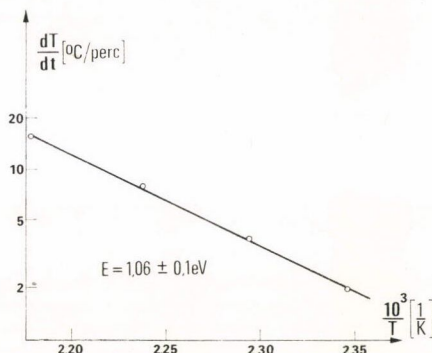
4.8. ábra. A szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyban levő zónák bomláshője térfogati hányaduk, illetve Zn-tartalmuk függvényében

2,9 J/g%. Mivel a 3.2. szakasz értelmében a térfogati hányad a Zn-tartalomnak lineáris függvénye, a bomláshő is az. Ezért a 4.8. ábrára az abszcisszához a Zn-koncentrációt is berajzoltuk. Meg kell azonban jegyezzük, hogy Ungár és munkatársai (1979) eredményei szerint a Zn-koncentráció és a bomláshő között ez a lineáris kapcsolat 2,5 at % Zn-tartalom felett megszűnik, Q függetlenné válik a Zn-koncentrációtól. E szerzők kimutatták, hogy ennél a koncentrációnál a T_{GP} görbe és az η' homogén-heterogén nukleációjának határgörbéje metszi egymást. Ha tehát egy 2,5 at %-nál nagyobb Zn-koncentrációjú, szobahőmérsékleten képződött zónákat tartalmazó ötvözet hőmérsékletét növeljük, a T_{GP} alatt a szobahőmérsékleten képződött kisebb zónák bomlásával egyidőben megindul η' homogén nukleációja is,

amely — mint korábban láttuk — kezdetben szintén koherens képződményeket, GP zónákat eredményez. Így ezeknél a nagy Zn-koncentrációval rendelkező ötvözeteknél nem tudunk teljes reverziót észlelni, feltehetőleg azonban a szobahőmérsékleti zónák ebben az esetben is felbomlanak, és nem alakulnak át közvetlenül magas-hőmérsékletű zónákká, illetve η' -vé.



4.9. ábra. A zónák stabilitásának változása a szobahőmérsékleti nemesítés idejével az 5. és 6. ötvözetben a DSC-csúcs hőmérséklete alapján (felfűtési sebesség 80 °C/perc)



4.10. ábra. A DSC diagramok csúcshőmérséklet—felfűtési sebesség összefüggése alapján szerkesztett Arrhenius-egyenes. A mérések a 13. ötvözet szobahőmérsékleten metastabil egyensúlyban levő mintáin történtek

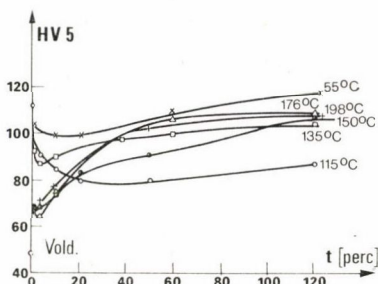
A zónák stabilitását jellemzi adott felfűtési sebesség esetén a DSC diagramok csúcshőmérséklete. Látható a 4.9. ábráról, hogy a stabilitás az öregítési idővel erősen nő. Bár az öregítésnek ebben a periódusában a 3.3. szakasz értelmében az összetétel változására kevés adat áll rendelkezésünkre, valószínűnek látszik, hogy a stabilitás növekedésében mind az összetételnek, mind a méretváltozásnak szerepe van.

A DSC-vizsgálatnál a felfűtés sebességét változtatva a csúcshőmérséklet eltolódásából mód van a reverzió aktiválási energiájának a meghatározására is. A 13. ötvözetben szobahőmérsékleti metastabil egyensúlyból kiindulva végzett mérés alapján szerkesztett Arrhenius-diagramot mutat a 4.10. ábra. Az iránytangensből a reverzió aktiválási energiája $1,06 \pm 0,1 \text{ eV}$, ami kisebb az ötvözők diffúziójának aktiválási energiájánál. Ez azt mutatja, hogy a zónák valamennyi vakanciát is megkötvé tartanak, és bomlásukkor ezek gyorsítják az ötvözők diffúzióját. Hasonló következtetésre jutott Asano és Hirano (1968/a.) is, bár ők a mienkkel azonos összetételű ötvözetükön szobahőmérsékleten képződött zónák reverziójánál $0,67 \text{ eV}$ aktiválási energiát mértek, ami még erőteljesebb vakanciatartalomra utal.

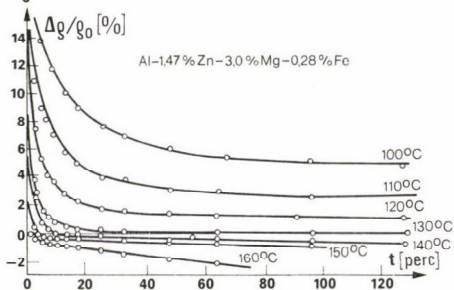
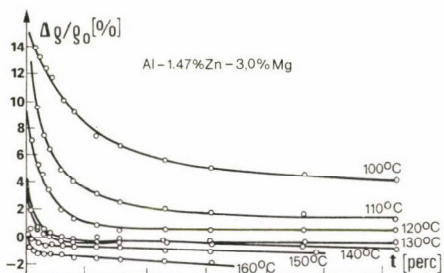
4.3. A szennyezők befolyása a szobahőmérsékleten képződött zónák reverziójára

Vizsgáltuk a Si és a Fe hatását a zónák reverziójára is. A 4.11. ábra a 0,1 at% Si-tartalmú 5. típusú ötvözet reverziós viselkedését mutatja keménységmérések alapján. Az ötvözetben — szemben az alapötvözetrel — nem jön létre tökéletes reverzió. Ez annak a következménye, hogy a ZnMg zónákkal párhuzamosan MgSi típusú zónák is képződtek szobahőmérsékleten (lásd 3.4. szakaszt), és ezek nem reverálódnak.

A fentiek következtében természetesen nem tudtuk meghatározni a szilíciumnak a reverziós hőmérsékletre kifejtett hatását sem. A keménységnek, illetve a fajlagos



4.11. ábra. Az 540 °C-os oldás után 44 napig szobahőmérsékleten öregített 0,1 at% Si-tartalmú 5. típusú ötvözet keménységének változása a reveráló hőkezelés paramétereinek a függvényében



4.12. ábra. A vasadalék hatása a reverzióra fajlagos ellenállásmérés alapján

ellenállásnak vizsgálataink során megfigyelt csökkenéséből azonban arra következtethetünk, hogy az *Thackery* és *Thomas* (1971) adataival ellentétben nem lehet számottevő.

A vas befolyását a szobahőmérsékleti zónák reverziós hőmérsékletére a 4.12. ábra érzékelteti. Mint innen megállapítható, az alapötvözet kb. 130 °C-os reverziós hőmérsékletét 0,23 at% Fe kb. 140 °C-ra növeli.

A két szennyező együttes hatását csak technikai tisztaságú ötvözeiteinken, a technológiai gyakorlatnak megfelelő 480 °C-os oldó hőkezelés után tanulmányoztuk. A 3.4. szakaszban ismertetett stabil primér kiválások kialakulása miatt a technikai tisztaságú mintáknál a reverzióban csak gyenge vashatás jelentkezett.

4.4. A magasabb hőmérsékleteken képződött zónák reverziója

Mint a 4.13. ábrából láthatjuk, ugyan-csak nincs teljes reverzió a magasabb hőmérsékleteken képződött zónák esetén sem. Az ábra az 5. ötvözetnél mutatja az egy perces reveráló hőkezelés hőmérsékletének a függvényében a folyáshatár változását 20, 50 és 90 °C-on metastabil egyensúlyig öregített mintákon. Az 50 °C-on végzett öregítés után még teljes a reverzió, csak a reverziós hőmérséklet nő, feltehetőleg részben az eltérő összetétel (*Gerold* 1977), részben a nagyobb zónaméret miatt. A 90 °C-on hőkezelt minták keménysége viszont alig változik egy perces reveráló hőkezelés hatására. Hasonló eredményekre jutottunk a 6. ötvözetnél is.

A jelenségek részletes tanulmányozására vizsgáljuk meg a 90 °C-on képződött zónák által okozott integrális intenzitásváltozást a revertáló hőkezelés idejének a függvényében. Ezt a 4.14. ábra mutatja az 5., illetve a 6. ötvözetre. Látható, hogy alacsony hőmérsékleten kezdetben az integrális intenzitás, tehát a zónák mennyisége csökken, magasabb hőmérsékleten azonban növekedéssel kezdődik a folyamat. A 3.5. szakasz értelmében 90 °C-on kétféle zóna képződik. Alacsony hőmérsékleten végrehajtott revertáló hőkezelés esetén kezdetben ezek közül a szobahőmérséklet környezetében stabil GP I. zónák felbomlnak, a GP II. részecskék azonban nem, hanem tovább nőnek a feloldódott GP I. rováására. Ha a revertáló hőkezelést magasabb hőmérsékleten végezzük, az oldás olyan gyors, hogy már csak a GP II. részecskék növekedését észleljük az egy percnél hosszabb hőkezelés után végzett méréssel. Mint a 4.14. ábrából látható, ez a váltás a Zn₂Mg összetételhez közelebb álló 5. ötvözetnél előbb következik be, mint a 6-nál.

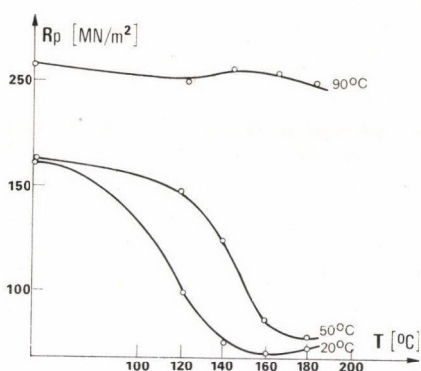
Igen valószínű, hogy a GP II. részecskék közvetlenül átnőnek η' -be. Erre utal egyrészt magasabb hőmérsékleteken, hosszabb idő után a fajlagos ellenállás erőteljes esése, másrészt az, hogy Ungár (1979) vizsgálatai szerint a GP II-höz tartozó kaloriméterrel mért csúcs maximumának hőmérséklete folyamatosan megy át η' -ébe.

A magasabb hőmérsékleten képződött zónák stabilitását is jellemezhetjük a DSC-diagramok csúcshőmérséklete alapján. Látható a 3.18. ábráról, hogy az azonos idő (6 óra) alatt különböző hőmérsékleteken keletkezett zónák stabilitása mindkét típusnál erősen nő a képződés hőmérsékletével. Ez a stabilitásváltozás valószínűleg részben az összetétel változásának, részben a méretnövekedésnek a következménye.

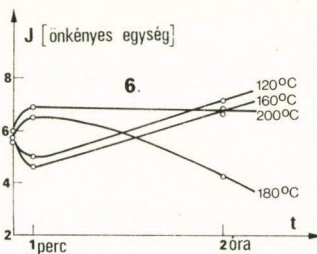
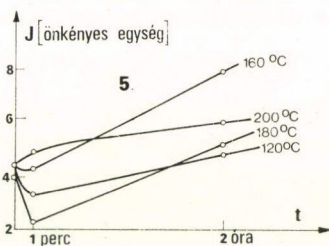
4.5. Újraöregedés szobahőmérsékleten

Mivel a hegesztett kötés egy bizonyos környezetben mindig létrejön a reverzió, majd utána ezek a tartományok szobahőmérsékleten újraöregednek, az újraöregedésnek nagy gyakorlati fontossága is van.

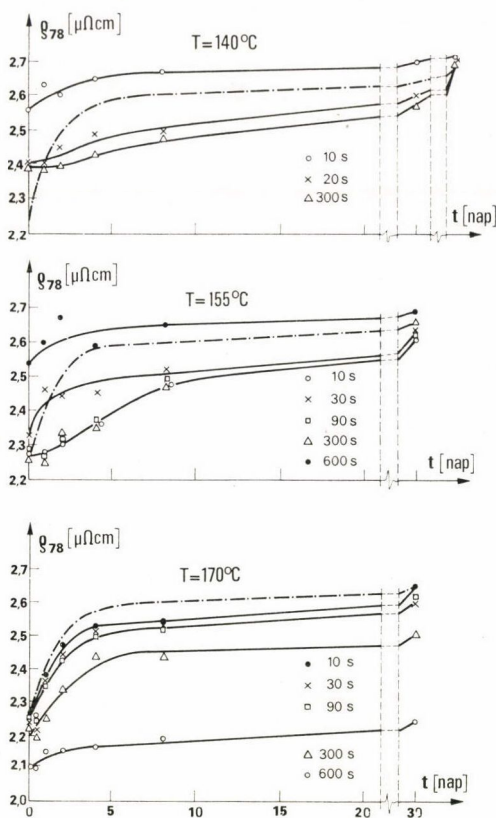
A 4.15. ábra az előzőleg egy évig szobahőmérsékleten öregített III. minta újraöregedését mutatja 140, 155 és 170 °C-on különböző ideig végzett revertáló hőkezelés után. Mindegyik diagramra be-



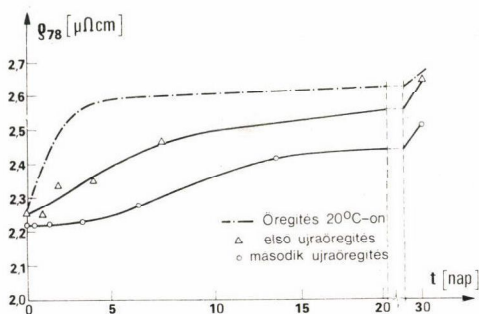
4.13. ábra. 20, 50, illetve 90 °C-on metasztabil állapotig öregített minták folyáshatára az egy perces revertáló hőkezelés után



4.14. ábra. Az integrális intenzitás változása a 90 °C-on öregített 5. és 6. ötvözetnél különböző hőmérsékleteken végrehajtott revertáló hőkezelések folyamán



4.15. ábra. A szobahőmérsékleti öregítés során 140, 155, illetve 170 °C-on különböző ideig hőkezelt III. minta fajlagos ellenállásának a változása az újraöregedés során. Az eredményvonal az edzést követő eredeti öregedést mutatja



4.16. ábra. Az edzett, 155 °C-on egyszer, illetve kétszer revertált III. minta újra-nemesedési karakterisztikája

rajzoltuk eredményvonalal a minta eredeti nemesedési karakterisztikáját is. A 140 °C-on hőkezelt minta 90 nap után minden esetben elérte a reverzió előtti állapotot. Ugyanez áll a 155 °C-on revertált mintákra is, de itt megfigyelhető, hogy a legalább 90 s-ig hőkezelt mintákban az újraöregedés csak meglehetősen lassan indult. A 170 °C-on revertált mintákban már azt tapasztaljuk, hogy a hőtartás idejét növelve egyre több és több η' fázis képződik, ami elvonja az ötvözőket az újbóli zónaképződéstől.

Láttuk, hogy a 155 °C-on bekövetkezett teljes reverzió után az újranemesedés lassabban indul. Ez a vakanciák szerepére utal, amire már a 4.2. szakaszban rámutattunk. Méginkább alátámasztja ezt a 4.16. ábrán többszöri reverziót követő újranemesedés, amit egyre lassabb fel-futású görbe jellemez. Valószínű, hogy a zónákhoz kötődött vakanciák egy része a revertáló hőkezelés során megsemmisül, ezért az újraöregedés-kor lassabb a diffúzió.

5. A GP zónák hatása

5.1. Szobahőmérsékleten képződött zónák ellenállás-járuléka

Több javaslatot (Mott 1937, Geisler 1951, Fine 1959) dolgoztak ki annak a magyarázatára, hogy miért növelik a GP zónák az ötvözet fajlagos ellenállását. A leggyümölcsözőbbnek Mott elmélete bizonyult, aki feltételezte, hogy az elektronok akkor szóródnak maximálisan, amikor hullámhosszuk megegyezik a zónák méretével. Ezt alapul véve Wilkes (1968) az optikai elhajlás analógiája alapján, Hillel (1970), valamint Hillel és munkatársai

társai (1975) a zónák mikroszerkezetének Bragg-szórását figyelembe véve, Edwards és Hillel (1977) pedig első princípiumok alapján számította ki a zónák ellenállás-járulékát. Az utóbbi elméletet Hillel és Edwards (1977) — megfelelő empirikus paramétereket figyelembe véve — jól tudta egyeztetni a binér AlZn ötvözetben kapott kísérleti eredményekkel, és értelmezni tudta ennél az ötvözetnél a fellépő ellenállás-maximumot is (Panseri és Federighi 1960, Osamura és munkatársai 1973).

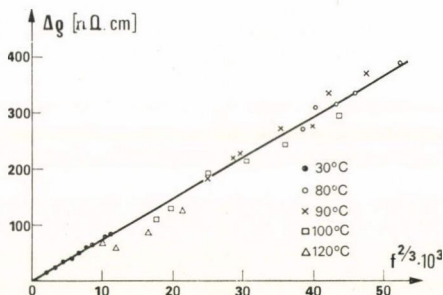
A terner AlZnMg ötvözetre hasonló elméleti megfontolásokról nem tudunk. Ebben az ötvözet típusban szobahőmérsékleten nem észleltek ellenállás-maximumot (Ceresera és Fiorini 1972, Soeno és Chigasaki 1973, Gupta és Mallik 1975), eltekintve a néhány tized százalékánál kevesebb Mg-ot tartalmazó ötvözetektől (Panseri és Federighi 1963, Ohta és Hashimoto 1964, Suzuki és munkatársai 1972/c.). Feltehetőleg ez annak a következménye, hogy az AlZnMg ötvözetekben a zónák mérete a szobahőmérsékleten nem nő 2–3 nm fölé (Dünkeloh és munkatársai 1974, Schmalzried és Gerold 1958, Nicholson és munkatársai 1958–59, Kawano és munkatársai 1970).

A zónák ellenállásra kifejtett hatásának a tisztázása érdekében vizsgáltuk a III. ötvözetben a kapcsolatot a zónák térfogati hányada és fajlagos ellenállás-járuléka között a szobahőmérsékleti öregítés során 60 napig és az ezt követő 80–120 °C között végrehajtott 1–120 perces revertáló hőkezelések után. Az utóbbi — mint a 4.2. szakaszban láttuk — Ostwald-érés következtében jelentősen megváltoztatja a zónák méreteloszlását. Az 5.1. ábrán a szilárdoldat állapothoz viszonyított fajlagos ellenállás-növekedést ábrázoltuk a zónák térfogati hányada $\frac{2}{3}$ -ik hatványának a függvényében. Látható, hogy az összefüggés jól közelíthető egy egyenessel. Ez azt jelenti, hogy a zónák ellenállás-járuléka össz-keresztmetszetükkel arányos, és legfeljebb csak kis mértékben függ a méreteloszlásuktól. Azonos sugarú gömb alakú zónákat feltételezve, az egyenes iránytangenséből 62 nΩcm adódik 1% térfogati hányad ellenállás-növekményére. A 3.3. szakaszban hasonló eredményre jutottunk a 6. ötvözet növekedési periódusának tanulmányozásakor is.

Megvizsgáltuk az ellenállás-növekmények a változását a 3.2. szakasz alapján a zónán belül az ötvözők koncentrációjának a függvényében is. A megfelelő adatokat a III. táblázat tartalmazza. A táblázatban a zónákon belül az ötvözőkoncentrációkat és a térfogati hányadot a II. táblázatból vettük. Tekintettel a kis ötvöző-koncentrációkra, feltételeztük, hogy az oldott Zn és Mg, valamint a zónák ellenállás-járuléka lineárisan adódik hozzá a tiszta alumínium ellenállásához. Ebben az esetben a szobahőmérsékleten beállt metastabil állapotban a fajlagos ellenállás növekménye a szilárdoldat állapotához képest:

$$\Delta \rho = \rho^Z - \rho^{Zn}(x - x_1) - \rho^{Mg}(y - y_1), \quad (5.1)$$

ahol ρ^Z a zónák, ρ^{Zn} és ρ^{Mg} pedig az oldott állapotban levő megfelelő ötvözők egy atomszázalékának az ellenállás-járuléka. Méréseink szerint a lineáris összefüggés a vizsgált ötvözeteknél jól teljesül.



5.1. ábra. Összefüggés a fajlagos ellenállás növekménye és a GP zónák térfogati hányada között a III. ötvözetnél

III. TÁBLÁZAT

A nagy tisztaságú ötvözetek ellenállás adatai

Ötvözet jele	x (at %)	y (at %)	f (%)	ρ^q ($\mu\Omega$ cm)	$\Delta\rho$ ($\mu\Omega$ cm)	ρ^Z ($\mu\Omega$ cm)
1.	2,5	3,3	4,15	2,75	0,74	2,27 – 245
2.	2,5	1,1	4,15	1,59	0,48	1,37
3.	1,0	1,1	2,88	1,56	0,43	1,18
4.	1,9	1,1	2,76	1,30	0,20	0,94
5.	1,9	1,7	2,66	1,67	0,48	1,50
6.	1,5	2,8	1,75	2,13	0,39	1,06 – 1,11
7.	1,5	1,2	1,75	1,37	0,22	9,90
8.	1,0	0,6	0,62	0,93	0,08	0,33
11.	0,7	1,1	—	—	0,02	—
12.	1,5	1,1	1,75	—	0,85	0,85
13.	2,1	1,1	3,29	—	1,20	1,20

A III. táblázatban feltüntetettük a szilárdoldat állapotban kapott fajlagos ellenállás értékeket is. A lineáris összefüggés még itt is érvényesnek bizonyult. Amennyiben tehát a tiszta Al fajlagos ellenállását ρ^{Al} -mal jelöljük, a szilárdoldatra

$$\rho^q = \rho^{Al} + \rho^{Zn} \cdot x + \rho^{Mg} \cdot y. \quad (5.2)$$

A táblázat adataiból ρ^{Zn} és ρ^{Mg} -ra a legkisebb négyzetek módszerével az alábbiak adódnak:

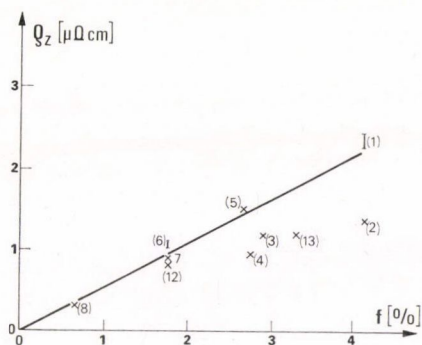
$$\begin{aligned} \rho^{Zn} &= 0,26 \mu\Omega \text{ cm/at} \%, \\ \rho^{Mg} &= 0,52 \mu\Omega \text{ cm/at} \%. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Ezek az adatok jó egyezésben vannak Fickett (1971), Kedves és munkatársai (1972), Kovács—Csetényi (1976), Lendvai és munkatársai (1977), valamint Takamura és munkatársai (1978) eredményeivel.

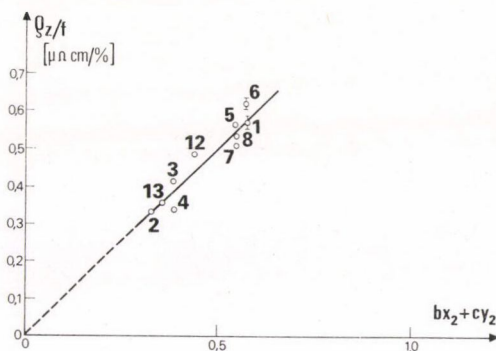
Az (5.3) alatti értékeket és a II. táblázatot figyelembe véve (5.1) alapján meghatározható ρ^Z . Az így kapott értékeket a III. táblázat szintén tartalmazza, az 5.2. ábra pedig ρ^Z -t mutatja a zónák térfogati hányadának a függvényében. Az 1., illetve 6. ötvözetre a határértékeket a II. táblázat megfelelő y_1 szélsőértékeiből vettük. Látható az ábráról, hogy az azonos konóda mentén fkvő 5., 7. és 8. ötvözet ρ^Z értékei lineáris függvényei f -nek, tehát az egységnyi térfogati hányadra eső ellenállás-járulék azonos. Az is megfigyelhető az ábrából, hogy a kisebb Mg-koncentrációval rendelkező 2., 3., 4., 12. és 13. ötvözetekhez kisebb, a nagyobb Mg-tartalmú 1. és 6. ötvözetekhez nagyobb ρ^Z/f érték tartozik. Ez azt jelenti, hogy az egységnyi térfogati hányadnak megfelelő ellenállás-növekmény a zónák Mg-tartalmának növekedésével nő. Ennek alapján feltettük, hogy ρ^Z/f lineáris függvénye az x_2 és y_2 koncentrációnak (ezeket lásd a II. táblázatban):

$$\rho^Z/f = a + bx_2 + cy_2. \quad (5.4)$$

A mérési eredményekhez (5.4) alapján egyenest illesztve, az alábbi együtthatók



5.2. ábra. A GP zónák ellenállás-járuléka térfogati hányaduk függvényében a szoba-hőmérsékleti metastabil állapotban



5.3. ábra. A fajlagos ellenállásnak a zónák egységnyi térfogatra eső növekménye a Zn- és Mg-koncentrációk lineáris kombinációjának a függvényében

adódtak:

$$\begin{aligned} a &= 1,81 \times 10^{-8} \mu\Omega\text{cm/at} \cdot \text{zóna} \% \approx 0, \\ b &= 0,41 \mu\Omega\text{cm/at} \cdot \text{zóna} \%, \\ c &= 0,75 \mu\Omega\text{cm/at} \cdot \text{zóna} \%. \end{aligned} \quad (5.5)$$

(5.4)-ben x_2 -t és y_2 -t nem atomszázalékban, hanem atomi hányadban helyettesítettük be. Az (5.4) lineáris összefüggés az 5.3. ábra értelmében jól illeszkedik a kísérleti adatokhoz, különösen ha figyelembe vesszük, hogy a koncentráció-meghatározás hibája többszörösen belejátszik (5.4) hibájába.

A fajlagos ellenállásértékeknek ez a szabályszerűsége egy további alátámasztása a zónák összetételére a 3.2. szakaszban tett megfontolásaink helyességének.

(5.5) alapján $c/b \approx 1,8$, vagyis a Mg atomok járuléka a zónaellenálláshoz lényegesen nagyobb, mint a Zn atomoké. (5.3) értelmében a szilárdoldatban ez az arány még nagyobb. Mivel a Zn és Mg valenciaszáma azonos mértékben tér el az Al-étől, feltehető, hogy a Mg nagyobb ellenállásnövelő hatása elsősorban mérettényezőjével függ össze, ami mind a mátrixban, mind a zónában érvényesül.

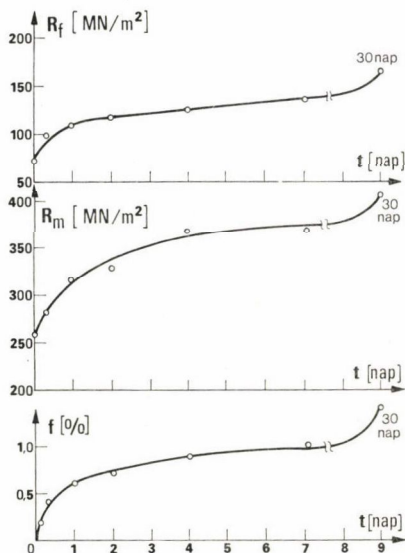
5.2. A zónák hatása a mechanikai tulajdonságokra

Az AlZnMg ötvözetek egyik hátránya, hogy a hegesztés után megnő a törékenyséjük. Thomas és Nutting (1959-60) ezt a szemcsehatároknál kialakuló kiválásmentes zónában a diszlokációk nagy mozgékonyásával magyarázta, Ryum (Ryum és munkatársai 1967, Ryum és Baardseth 1968, Ryum 1968) pedig az ötvözet alakításakor képződő diszlokációs kötegek és a szemcsehatárok metszésénél fellépő nagy feszültségekre vezette vissza. Hornbogen (1978) a diszlokációs kötegek kialakulását mind zónák, mind az η' kiválások esetén (Ryumék ebben az esetben is megfigyeltek kötegeket) a részecskék átvágása révén lejátszódó diszlokáció-mozgással hozta kapcsolatba. A már egyszer átvágott zóna, illetve kiválás újabb és újabb átvágása ugyanis ugyanabban a csúszási síkban egyre kisebb munkát igényel. Így egyes kitüntetett síkokban a diszlokációk mindaddig könnyen mozoghatnak, amíg egymás

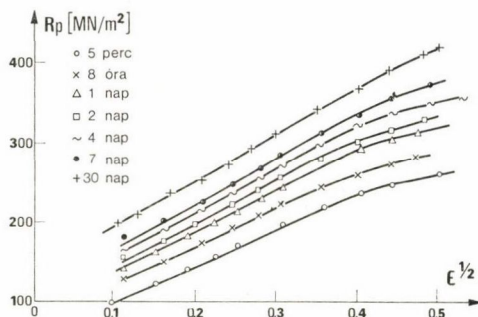
feszültségterében fel nem torlódnak. *Banizs* (1978) ugyancsak megfigyelt ilyen kötegeket igen hosszú szobahőmérsékleti hevertetés után a II. ötvözetünkkel azonos összetételű mintáiban.

Mi a III. ötvözetben vizsgáltuk szobahőmérsékleten az egy irányú nyújtással különböző mértékben alakított minták sajátosságait. A zónák térfogati hányadának, szakítószilárdságának és folyáshatárának változását a nemesedési idő függvényében az 5.4. ábra mutatja.

Az 5.5. ábrán az egyes mérések során kapott feszültségértékeket ábrázoltuk a deformáció (relatív megnyúlás: $\varepsilon = \Delta l/l_0$) négyzetgyökének a függvényében. Látható,



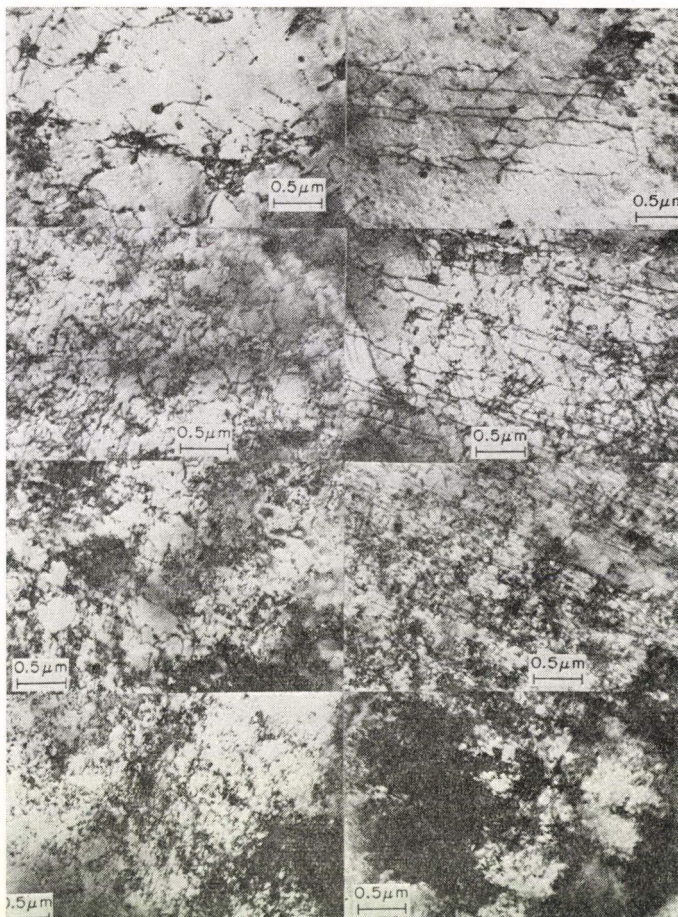
5.4. ábra. A szobahőmérsékleti öregítés hatása a GP zónák térfogati hányadára, szakítószilárdságára és folyáshatárára a III. ötvözetben



5.5. ábra. Az $R_p - \varepsilon^{1/2}$ összefüggések a III. ötvözet szobahőmérsékleten különböző ideig nemesített mintáira

hogy ezek a függvények mintegy 15% deformációig lineárisak, iránytangensük a nemesítési idővel csak kissé nő. Az 5.6. ábrán transzmissziós elektronmikroszkópi felvételeken mutatjuk be az edzett és a 7 napig hevertetett mintákon a diszlokációs szerkezet változását az alakítás mértékével. Az edzett mintákban kis deformáció hatására rendezetlen diszlokációs szerkezet alakul ki, és ez a jelleg 12% alakításig nem is változik, csak a diszlokációsűrűség nő. A szobahőmérsékleten 7 napig öregített mintákban kis deformációknál határozottan rendezett diszlokációs szerkezet jön létre, és a rendeződési hajlam — mint az az 5.7. ábrából látható — az öregítési idővel nő. Hasonlóképp nő az aktivált csúszási síkok távolsága is. Nagyobb deformációknál a diszlokációk rendezetlenné válnak.

Az a tény, hogy a feszültség—deformáció görbe szinte az egész alakítási tartományban megtartja parabolikus jellegét, azt mutatja, hogy az ötvözetben az öregítési állapottól függetlenül az alakítási keményedés egyetlen lépcsője (a tiszta fémek

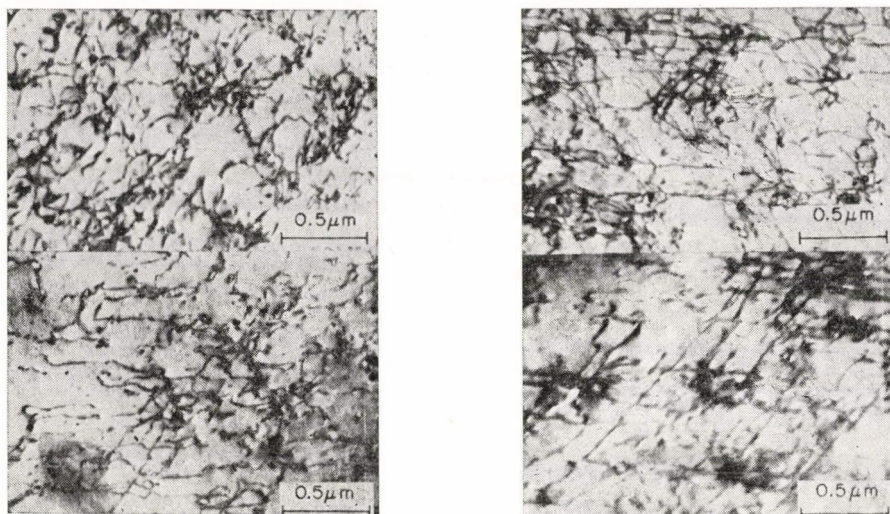


5.6. ábra, A diszlokációs szerkezet elektronmikroszkópi képe a III. ötvözet edzett (a), illetve 7 napig szobahőmérsékleten öregített (b) mintáinál különböző mértékű húzóalakítások után

III. lépcsője) jön létre. *Fine* (1975) megmutatta, hogy ez a jelleg az átvágási mechanizmusra jellemző. Az elektronmikroszkópi vizsgálatok ezt megerősítik. A rendezett diszlokációs szerkezet ugyanis arra utal, hogyha a zónákat egyszer már átvágta egy diszlokáció, akkor a többi is ebben az aktivált síkban igyekszik mozogni. Ha a zónák száma és mérete a nemesedés előrehaladásával nő, az aktivált csúszási rendszerek száma csökken.

Méréseink alapján mód van a zónák Γ_0 fajlagos átvágási munkájának meghatározására is. A zóna átvágásához szükséges nyíró feszültség ugyanis a következőképpen írható (*Gerold* 1971, *Brown és Ham* 1971, *Ungár és munkatársai* 1976):

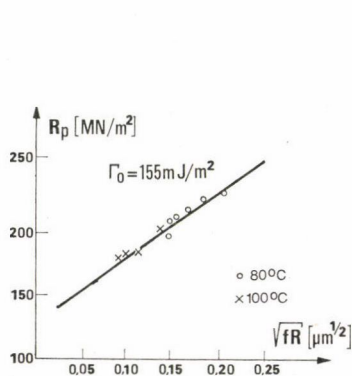
$$\Delta\tau = \frac{\Gamma_0^{3/2}}{2^{1/4} b T^{1/2}} (fR)^{1/2}, \quad (5.6)$$



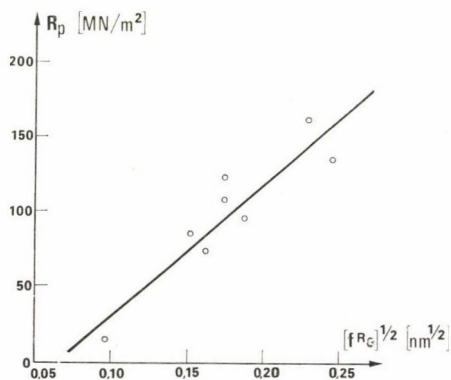
5.7. ábra. A III. ötvözet szobahőmérsékleten különböző ideig öregített mintáiban a diszlokációs szerkezet elektronmikroszkópi képe, 3%-os alakítás után

ahol b a Burgers-vektor értéke, a diszlokációk vonal menti feszültsége pedig: $T \approx 1/2 \mu b^2$ (Kovács és Zsoldos 1973). A zónák f térfogati hányada és R_G Guinier-sugara (gömb alakot feltételezve) röntgen kisszögű szórás méréseinkből rendelkezésünkre áll. Ebből az R valódi sugár (3.4) alapján számítható.

Amennyiben feltételezzük, hogy a zónák átvágásához szükséges feszültség additív módon növeli a folyáshatárt, és figyelembe vesszük, hogy $\Delta R_p = 3\Delta\tau$ (Gerold 1971), (5.6) értelmében a folyáshatár növekménye lineáris függvénye kell legyen $(fR)^{1/2}$ -nek. Az 5.8. ábra igazolja ezt a linearitást, így bizonyítja, hogy a diszlokáció-



5.8. ábra. A folyáshatár mint $(fR)^{1/2}$ függvénye a III. ötvözet szobahőmérsékleten öregített, majd magasabb hőmérsékleten Ostwald-éresnek alávetett mintáinál



5.9. ábra. A nagy tisztaságú ötvözetekben a folyáshatár növekedése $(fR)^{1/2}$ függvényében szobahőmérsékleten metastabil állapotban

mozgás valóban a zónák átvágása révén játszódik le. Az egyenes iránytangenséből a fajlagos átvágási munka:

$$\Gamma_0 = 155 \frac{\text{mJ}}{\text{m}^2}.$$

Megvizsgáltuk a szobahőmérsékleti metastabil egyensúlyban levő ötvözet összetételének a hatását is a folyáshatárra. A szilárdoldat állapotban az ötvözetek folyáshatárát (R_p^q), valamint a zónaképződés során létrejött növekményt (R_p) a IV. táblázat tartalmazza.

IV. TÁBLÁZAT

A nagy tisztaságú ötvözetek szilárdság adatai

Ötvözet jele	x	y	f	R_G	R_p^q	R_p
	(at %)	(at %)	(%)	(nm)	(MN/m ²)	(MN/m ²)
1.	2,5	3,35	4,15	1,28	91	161
2.	2,5	1,1	4,15	1,46	51	135
3.	2,0	1,1	2,88	1,05	40	122
4.	1,9	1,1	2,76	1,1	35	107
5.	1,8	1,7	2,66	1,34	65	96
6.	1,5	2,8	1,75	1,32	56	85
7.	1,5	1,2	1,75	1,50	37	73
8.	1,0	0,6	0,62	1,52	30	15

Az 5.9. ábrán ábrázoltuk a folyáshatár növekményét $(fR)^{1/2}$ függvényében. Mint az ábráról látható, a folyáshatár-növekmény jó közelítéssel lineáris függvénye $(fR)^{1/2}$ -nek, amelynek iránytangense $87,5 \cdot 10^5 \text{ MN/m}^{5/2}$.

6. Az η' átmeneti fázis

6.1. Az irodalmi eredmények áttekintése

Graf (1956) tapasztalta először, hogy a zónákra jellemző diffúz röntgenszórási kép 50–100 °C között folyamatosan élesedik: az (100) reflexió először részekre bomlik, majd fokozatosan eltűnik, miközben a (200) reflexió megerősödik. A szerkezet így egyre inkább hasonlóná válik a hexagonális η fázis rácsához, de nem azonos vele. A képződő átmeneti fázisnak a részecskéi a GP zónákkal ellentétben még 200 °C-on sem reverálódnak.

Graf (1957) meghatározta az átmeneti fázis szerkezetét is. Megállapította, hogy a hexagonális kiválás főtengele az $[111]_{\text{Al}}$ irányba mutat, $a=0,496 \text{ nm}$, $c=6d_{[111]_{\text{Al}}}=1,403 \text{ nm}$. Ennek alapján feltehető, hogy $d_{[100]_{\eta'}}=d_{[112]_{\text{Al}}}$. A részecskék átmérője Gráfnál 100 °C-on 72 órás hőkezelés után kb. 12 nm, vastagságuk 3 nm volt.

Később többen vizsgálták η' szerkezetét. Mondolfo és munkatársai (1956) Grafhoz hasonló eredményre jutott. Gjønnes és Simensen (1970), valamint Auld és Cousland (1971, 1974) monoklin szerkezetet tételez fel. Az utóbbi szerzők pontosították az η' összetételét is: $\text{Mg}_4\text{Zn}_{11}\text{Al}$, orientációs kapcsolatára pedig azt találták, hogy

$$(0001)_{\eta'} \parallel (1\bar{1}1)_\alpha, (10\bar{1}0)_{\eta'} \parallel (110)_\alpha.$$

Később Chou (1978) egy másik orientációs viszonyt is észlelt:

$$(10\bar{1}0)_{\eta'} \parallel (100)_{\alpha}, (0001)_{\eta'} \parallel (01\bar{1})_{\alpha}.$$

Mondolfo és munkatársai (1956) szerint η' képződése a rétegződési hibákon indul, ide szegregálódnak az ötvözők úgy, hogy javuljon a rácsszerkezetben az illeszkedés. Ezért a Zn- és Mg-atomoknak rétegekben kell elhelyezkedniük és a méretviszonyok miatt az Al-mátrixhoz az érintkezés Zn-síkokkal kell, hogy történjék. A képződés során a rétegek egyre nőnek, mígnem a méreteltérések következtében a koherencia fokozatosan megszakad. Ekkorra alakul ki az η fázis végleges, rendezett szerkezete. Így a képződés a szilárd oldatból η -ba Mondolfo szerint folyamatos.

A gondolat, hogy η' a rétegződési hibákon nukleálódik, máshol is felbukkan az irodalomban (Thomas, Nutting 1959-60), de korábban nem sikerült közvetlenül megfigyelni (Embury, Nicholson 1965). Legutóbb azonban Lyman és Vander-Sande (1976) kisméretű, teljesen koherens, hexagonális szerkezetű részecskéket észlelt elektronmikroszkóppal.

Nicholson és munkatársai (1958—59) a részben koherens η' körül feszültségkontrasztot nem tudtak észlelni. Később Embury és Nicholsonnak (1965) sikerült kis feszültségkontrasztot is megfigyelni az elektronmikroszkópi felvételeken.

Az utóbbiak vizsgálataik alapján úgy vélték, hogy η' fokozatosan nő át η -ba, miközben a lemez alakú részecskék rudakká válnak.

Thackery (1968) 2,5 at% Zn-, 2,2 at% Mg-tartalmú ötvözetén igen részletesen tanulmányozta a fázisképződést, azonban η' -t nem talált. Ennek alapján kétségbevonta, hogy ilyen fázis egyáltalán létezik. Gjønnes és Simensen (1970) igen gondosan tanulmányozta a fázisképződést kb. 2,4 at% Zn-, 1,1 at% Mg-tartalmú ötvözetükben. Ők 130 °C-on 1 órás hőkezelés után határozottan észleltek részben koherens részecskéket. Auld és Cousland szintén észlelt η' -t, vizsgált ötvözetük összetétele az $(\alpha + \eta)$ tartományba esett. Később megvizsgáltak egy $(\alpha + T)$ tartományba eső ötvözetet is, itt azonban nem találtak η' -t. Felhívták a figyelmet arra, hogy Graf (1956, 57) ugyancsak nem talált η' -t az $(\alpha + T)$ tartományba eső 2,9 at% Zn, 3,3 at% Mg ötvözetben, de észlelte az $(\alpha + \eta)$ -ba eső 3,8 at% Zn, 1,1 at% Mg összetételnél. Hasonló típusú volt Gjønnes és Simensen (1970) ötvözete is. Ezzel szemben Thackery (1968) ötvözete (2,5 at% Zn, 2,2 at% Mg) az $(\alpha + T)$ tartományba esett. Ellentmondanak a fentieknek Mondolfo és munkatársai (1956) eredményei, akik a Thackery-ével azonos összetételű ötvözetben határozták meg η' szerkezetét, valamint Ryum (1975) vizsgálatai ugyancsak egy, a Thackeryéhez közel álló összetételen.

Az η' fázis keletkezésének legtöbbet vitatott kérdése a magképződés. A probléma alapját Lorimernek és Nicholsonnak (1966) a 4.1. szakaszban már említett megfigyelése képezi, mely szerint a képződő η' részecskék diszperzitása függ az ötvözet előéletétől. Modelljük értelmében, amennyiben az ötvözetet a GP zónák stabilitási határa, T_{GP} alatt hőkezeljük, megindul a zónaképződés, és adott hőmérsékleten adott idő alatt meghatározott átlagos mérettel és méreteloszlással rendelkező GP zónák keletkeznek. Minden T hőmérséklethez tartozik egy kritikus d_c^T zónaméret, amely felett a GP zónák képesek a stabilabb fázis — esetünkben az η' átmeneti fázis — magjaivá válni. Ha a hőmérsékletet növeljük, a kisebb zónák felbomlanak, és az átnövésre alkalmas zónák száma csökken. Ha viszont valamilyen oknál fogva nagyobb a diffúziós fluxus (többlet-vakanciák, magasabb hőmérséklet), átlagosan nagyobb zónák képződnek, és több tud átnőni az η' fázisba.

A modell finomítása és általánosítása során *Lorimer* és *Nicholson* (1969) először a homogén nukleáció klasszikus elméletéből indult ki. Ennek értelmében egy α mátrixszal rendelkező szilárdoldatban a β fázisnak az időegység alatti

$$I_{\beta} = K_1 \exp \left\{ -\frac{\Delta G_c^{\beta}}{kT} \right\} \cdot \exp \left(-\frac{Q}{kT} \right) \quad (6.1)$$

magja képződik, ahol K_1 a vakancia-koncentrációtól függő tényező, ΔG_c a kritikus magméret eléréséhez, Q pedig az oldott ötvöző atomok migrációjához szükséges aktiválási energia. (6.1) alapján a magképződés erősen függ a túltelítettségtől. A homogén nukleáció mellett a β fázis részecskéi a diszlokációkon heterogén módon is nukleálódhatnak. A szerzők kritikusnak nevezik azt a túltelítettséget, amelynél a homogén magképződés sebessége éppen meghaladja a heterogénét. Kimutatják, hogy ehhez 100 °C nagyságrendű túlhűtés szükséges. Kis túlhűtések esetén is megfigyeltek azonban homogén eloszlású precipitációt, ezeknek a GP zónákon kellett létrejönniük. Mivel ugyanis $\Delta G_c^{GP} < \Delta G_c^{\beta}$, a homogén zónaképződés csak 10–20 °C túlhűtést igényel. A zónák a kis túlhűtési igény miatt mindig homogén módon jönnek létre, heterogén nukleációjuk elhanyagolható.

Vizsgáljuk meg most a GP zóna $\rightarrow \beta$ átalakulást. A β -képződéskor felszabaduló ΔG_V^{β} térfogati szabadenergiát két részből összetettnek tekinthetjük. Az egyik tagja a β -t alkotó ötvöző atomok összegyűlésével kapcsolatos, és kb. megegyezik a GP zónák képződésekor bekövetkező szabadenergia változással. A másik a magon belül az új kristálystruktúra létrejöttéhez szükséges. Az utóbbi tehát

$$\Delta G_c^{Tr} = \Delta G_c^{\beta} - \Delta G_c^{GP}. \quad (6.2)$$

Így azok a zónák, amelyek már meghaladják a β kritikus magméretét, könnyen átalakulhatnak β részecskékké, mert ehhez ΔG_c^{β} helyett már csak a ΔG_c^{Tr} aktiválási energiára van szükségük. Az összetétel-eltolódás ugyanis már a zónaképződéssel megtörtént.

A $T_1 < T_{GP}$ hőmérsékleten t_1 ideig végzett előöregítés során a zónáknak kialakul egy $N(d)_{T_1, t}$ zónaméret-eloszlása. Amikor ezután a hőmérsékletet a $T_2 > T_{GP}$ -re növeljük, a zónák oldódni kezdenek. A véges diffúziósebesség miatt azonban még egy ideig sokkal nagyobb ötvözőcsomók vannak az ötvözetben, mint a szilárdoldatból nukleálódó β magok. Ezek közül azok, amelyek meghaladják a kritikus méretet, átalakulhatnak β részecskékké, és ehhez csak a ΔG_c^{Tr} aktiválási energiára van szükségük, ami kb. $\Delta G_c^{\beta}/2$. Így nagy diszperzitású, homogén eloszlású (de nem homogén módon nukleálódott) kiválást kapunk.

Hosszabb ideig *Lorimer* és *Nicholson* „termodinamikai” modelljével *Pashley* „kinetikai” modelljét (*Pashley* és *munkatársai* 1967, *Jacobs* és *Pashley* 1969) állították szembe az irodalomban. Alapvető eltérés azonban a *Lorimer*–*Nicholson*- és a *Pashley*-modell között, hogy az utóbbi a zóna — kiválás átalakulás során nem tételez fel szerkezetváltozást, legfeljebb csak folyamatos átalakulást, az előbbi viszont igen.

Marth és *munkatársai* (1978) elképzelése szerint a kiválások a GP zónák határán heterogén módon is nukleálódhatnak, amikor is a magképződés energiagátját a zónahatár csökkenti. A szerzők véleménye az, hogy ez az eset megvalósulhat az AlZnMg ötvözetekben is. A *Marth*-modell bizonyos hasonlatosságot mutat a *Lorimer*–*Nicholson*-félével. A kiválás kezdetben ugyanis itt is a „mag”-zónákból elszívott ötvöző atomokból épül fel.

Az irodalomban számos szerző véli elfogadhatónak a Lorimer—Nicholson-modellt (Bardhan és Starke 1968, Smith és Grant 1969, Cornish és Day 1969, Sparry 1970, Kawano és munkatársai 1970, Suzuki és munkatársai 1972/c, Dünkeloh és munkatársai 1974, Chang és Morral 1975). Ezekkel a munkákkal kapcsolatban azonban felmerül néhány kérdés: Bardhan és Starke, valamint Smith és Grant ugyanis közel a T_{GP} alatt végezte a hőkezeléseit, lehet, hogy náluk már az η' -höz hasonló szerkezetű GP II. zónákon keletkeztek az η' részecskék. Kawanoéknak gondot okozott, hogyan tud átalakulni a $Zn:Mg=1:1$ összetételű zóna Zn_2Mg fázissá. Dünkeloh és munkatársai összes ötvözetükben a 2 nm-es zónaméretet tartják kritikusnak a gyors η' képződés szempontjából, megállapítják azonban, hogy a kis (2 at%) Zn-tartalmú ötvözetnél reverzió van, itt másfajta nukleációs mechanizmusnak kell működnie.

Prasad és Mallik (1973) elfogadhatónak tartja az átnövési mechanizmust, de nem ért egyet Lorimerék „kritikus zónaméret” elméletével. Véleményük szerint a szilárdoldat túltelítettsége szabja meg az átnövő zónák számát.

Teljesen visszautasítják Lorimer és Nicholson elméletét Asano és munkatársai (Asano és Hirano 1968/b, Hirano és Asano 1970, Asano és munkatársai 1976, 1977). Bár ők is megállapítják, hogy az alacsony hőmérsékleten végzett előregítés erősíti az η' képződést, de kaloriméteres méréseik szerint a GP zónák képesek koegzisztálni az η' kiválásokkal, sőt magasabb hőmérsékleteken túl is tudják élni azokat, így az η' részecskék nem képződhetnek a zónákból.

Ugyancsak elveti a Lorimer—Nicholson-modellt De Ardo és Simensen (1973) is. Tapasztalataik szerint 2,8 at% Zn-2,5 at% Mg összetételű ötvözetükben 100 °C-on közvetlenül hexagonális η' képződött, nem pedig zónák (zónák alatt azonban a szerzők a szobahőmérsékleti zónákat értik). Feltételezik ezért, hogy η' kifejlődése a Pashley-mechanizmussal történik.

Hasonlóképpen a Pashley-modell elfogadásának kell tekintenünk Ryumnak (1975) a 3.1. szakaszban ismertetett kettős nukleációs elméletét is, mert ennek értelmében a magasabb hőmérsékleten is életképes magok folyamatosan nőnek át η' -be, a másik magtípusból keletkezett zónák pedig felbomlanak. Ryum modelljét fogadják el Lacom és munkatársai (1979), valamint Zahra és munkatársai (1979) is. Ugyanakkor az utóbbi szerzők leszögezik, hogy elképzelésük nem mond ellent a Lorimer—Nicholson-modellnek.

Az η' fázis képződési kinetikájára igen kevés adat áll rendelkezésünkre, mivel a legtöbb módszer integráltan szolgáltatja a különböző fázisátalakulások eredményeit. Kawano és munkatársai (1970) röntgen kisszögű szórás vizsgálataik alapján 2,7 at% Zn, 1,3 at% Mg ötvözetükben 80 °C-on 3 nap alatt 18 nm átlagméretű részecskék keletkeztek, és ezek 21 nap alatt 30 nm-re nőttek. 135 °C-on már 4 óra múlva 30 nm volt az átmérő, ami 99 óra alatt 60 nm-re nőtt. 180 °C-on még észleltek a szerzők η' részecskéket, de a domináns fázis itt már η volt. Kétlépcsős hőkezelésnél 115 °C után 180 °C-on 100 perc alatt kb. 10 nm-es η' részek nőttek.

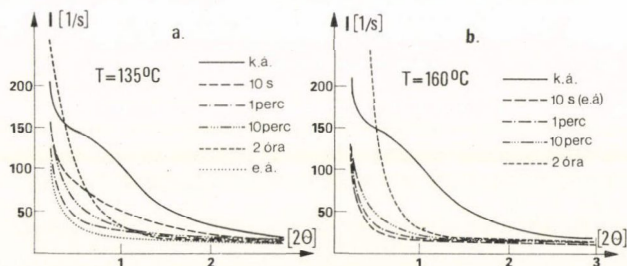
Az irodalom alapján tehát η' szerkezetét többé-kevésbé ismertnek tekinthetjük. Tisztázatlan azonban, hogy

- milyen ötvözetekben, milyen hőmérséklet-tartományban képződik;
- hogy megy végbe a nukleációja;
- hogyan történik a növekedése (kinetika);
- átalakul-e közvetlenül η -ba.

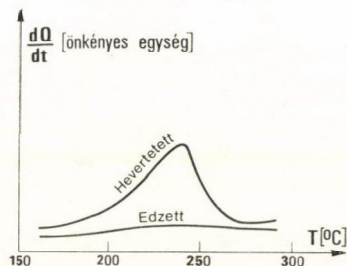
6.2. Az átmeneti fázis nukleációja

A 3. fejezetben láttuk, hogy eltérő típusú GP zónák képződnek szobahőmérséklet környezetében és magasabb (100 °C körüli) hőmérsékleteken. Ennek megfelelően külön-külön kell tárgyaljuk η' magképződését is attól függően, hogy milyen zónaszerkezetből indulunk ki.

Az érdeklődésünk középpontjába eső, nem túl nagy ötvöztartalmú AlZnMg ötvözetekben a szobahőmérséklet környezetében képződött zónák 130–150 °C körül egy percnél rövidebb idő alatt teljesen feloldódnak (lásd 4.2. szakaszt). A röntgen kisszögű szórás eloszlásában a kis szögeknel jelentkező intenzitás-növekedés (lásd 4.3. és 6.1. ábrát) azonban azt mutatja, hogy az oldódást rövideken újabb, lényegesen nagyobb méretű részecskék képződése követi. A kaloriméteres mérések értelmében ezek (összetételtől függően) 140–160 °C felett η' részecskék. Ugyanakkor az irodalmi összefoglalóban említett elektronmikroszkópos vizsgálat szerint η' jóval nagyobb diszperzitással képződik, ha az ötvözetben megelőzőleg szobahőmérsékleten keletkezett zónák voltak jelen.



6.1. ábra. A röntgen kisszögű szórás intenzitás-eloszlása a szobahőmérsékleten hosszú ideig öregített III. ötvözet mintáinál 135, illetve 160 °C-on különböző ideig végzett reverztáló hőkezelések után



6.2. ábra. Szobahőmérsékletre végzett edzés után 1 percn belül, illetve 7 napos hevertetés után 140 °C-on 3 óráig öregített minták DSC diagramjai

A 6.2. ábra alapján, amelyik szobahőmérsékletre végzett edzés után egy percn belül, illetve 7 napos hevertetés után 140 °C-ra hevített és ott 3 órán át hőkezelt minták DSC diagramjait mutatja, világosan látszik, hogy a szobahőmérsékleti zónák a képződő átmeneti fázis mennyiségét erősen növelik.

A teljes reverzió ténye kizárja, hogy η' képződése a Lorimer—Nicholson-féle (1966, 1969) átnövési mechanizmussal jöjjön létre. Ez nem is várható olyan összetételeknél, mint a III. ötvözet, amelyről a 6.2. ábra DSC diagramjai készültek, mivel a szobahőmérsékleten képződött zónákban $\text{Zn}/\text{Mg} \approx 1$, ugyanakkor η' -ben $\text{Zn}/\text{Mg} = 2$. Így az atomok átrendeződésével, amelyet Lorimer és Nicholson feltételezett, nem alakulhatnak a zónák η' -vé. Más nukleációs mechanizmust kell tehát keresnünk. Ez nem lehet a Marth és munkatársai-féle (1976) zónahatáron lejátszódó magképződés sem, mert ebben az esetben sem valósulhatna meg hosszabb időre a szilárdoldat állapot (4.1. ábra).

Az átalakulás jobb megértése érdekében becsljük meg, hogy a kiinduláskor R_0 sugárral, x_2 ötvöző-koncentrációval rendelkező zóna sugara az x_1 koncentrációval rendelkező mátrixban mennyi idő alatt válik zérussá, ha a mintát a reverziós

hőmérséklet fölé hevítjük. *Whelan* (1969) eredményei alapján

$$R(t) = R_0 - \frac{k}{2} \frac{Dt}{R_0} - \frac{k}{\sqrt{\pi}} \sqrt{Dt}, \quad (6.1)$$

ahol D a diffúziós állandó és

$$k = 2 \frac{x_s - x_1}{x_2 - x_s}. \quad (6.2)$$

(6.2)-ben x_s -sel az adott hőmérsékleten a szilárdoldat telítési koncentrációját jelöltük. Mivel éppen a reverziós hőmérséklet felett vagyunk, feltételezhetjük, hogy ez körülbelül azonos az ötvözet átlagos x koncentrációjával.

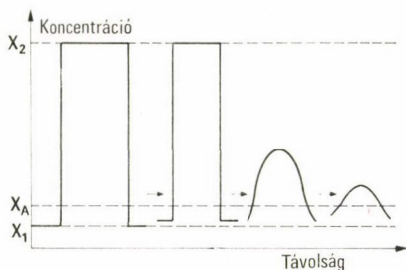
Nézzük meg, hogy az ötvözők mennyi idő alatt fogynak el a zónából, ha első lépésben feltételezzük, hogy az oldódás közben a *Whelan*-modell mindaddig érvényes, amíg R zérussá nem válik. A III-mal azonos összetételű, nagy tisztaságú 6. ötvözetre a II. táblázat alapján $k = 3,6 \cdot 10^{-2}$, a Zn diffúziós állandójának $T_{GP} \approx 150^\circ\text{C}$ -ra extrapolált értéke pedig $10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ (*Beke és munkatársai* 1977). Ezeknek az adatoknak a figyelembevételével a 0,8–1 nm sugarú zónákból a modell alapján a Zn kb. egy perc alatt diffundál szét. Mint a 4.2. szakaszban láttuk, kis mértékben többletvakanciák is rendelkezésre állnak ennek a gyorsítására. A Mg diffúziójára Zn jelenlétében csak nagyon bizonytalan adatok állnak rendelkezésünkre (*Renouard* 1951), valószínű azonban, hogy ez lassúbb. Ezzel szemben a zónák-

ból felszabaduló vakanciák elsősorban a Mg atomokhoz csatlakoznak, és ezeknek a mozgását gyorsítják.

Morinaga és munkatársai (1971) AlZn ötvözetre megmutatták, hogy a zónák felbomlása előbbi feltételezésünkkel szemben nem úgy történik, hogy az x_2 koncentráció állandó marad a teljes felbomlásig, hanem bizonyos zónaméret elérése után csökken. A viszonyokat a 6.3. ábra mutatja. *Morinaga* szerint a binér ötvözet Zn zónáiban az ötvözőkoncentráció 20–30 s után kezd csökkenni. Ennek bekövetkezése után már nem beszélhetünk az eredeti értelemben vett zónákról, a határuk is mindinkább elmosódott lesz, és a kialakuló ötvözőeloszlást egy ideig inkább koncentráció-ingadozásnak tekinthetjük. A rendezetlen szilárdoldat megvalósulásáig később következik be.

Ötvözetünknel a 4.4. ábra igazolja, hogy a zónák oldódásakor alacsonyabb hőmérsékleten a rendezetlen szilárdoldat állapot valóban nem áll be azonnal. Olyan hőmérsékleten ugyanis, amelyen az integrális intenzitás és a fajlagos ellenállás már teljes reverziót mutat, a folyáshatár minimuma még egyre csökken a hőmérséklettel, és csak kb. 200°C közelében éri el a szilárdoldatnak megfelelő értéket. Ez feltehetőleg annak a következménye, hogy a diszlokációmozgás sokkal érzékenyebb az ilyen koncentráció-fluktuációkra, mint a röntgen-, illetve az elektronszórás.

A koncentráció-maximumoknál — tehát a zónák korábbi helyén — a túltelített-



6.3. ábra. A koncentráció változása a zónában és környezetében a reverzió folyamán (*Morinaga és mtsai* 1971)

ség mértéke sokkal (kezdetben egy nagyságrenddel) nagyobb az átlagosnál, így itt a „homogén” magképződés sebessége is sokkal nagyobb kell legyen. Ezért „emlékezik” az ötvözet η' magképződése során a szobahőmérsékleten képződött zónákra.

A magasabb hőmérsékleteken kialakult zónák (GP II.) esetén más a helyzet. Ezeknek a szerkezete és összetétele nagyon hasonlít η' -éhez. Ungár (1979) kalori-méteres vizsgálataira engednek következtetni, hogy a GP II. zónák folyamatosan alakulnak át a részben koherens η' -vé. Ez a nézete *Lyman*-nak és *Vander-Sande*-nek (1976) is. Itt tehát feltehetőleg Pashley-mechanizmussal lejátszódó zóna \rightarrow átmeneti fázis átalakulásról van szó.

Az oldó hőkezelés hőmérsékletéről közvetlenül az öregítés hőmérsékletére a gyakorlatban nem szoktak edzeni, az η' heterogén magképződését ezért nem vizsgáltuk.

Fenti megállapításaink és az irodalmi adatok alapján a GP zóna \rightarrow kiválás átalakulásnak nézetünk szerint az alábbi fajtái lehetnek:

1) amennyiben a zónák és a kiválás összetétele azonos, és a szerkezetük is közel megegyezik (AlMgSi , AlZnMg : GP II. $\rightarrow \eta'$), vagy a zóna szerkezete részét képezi a második fázisnak (AlCu : GP I. $\rightarrow \theta''$), a második fázis Pashley-mechanizmussal folyamatosan képződik a zónából;

2) ha az összetétel kb. azonos, de a szerkezet különböző (AlGe), Lorimer—Nicholson-mechanizmussal történik az átnövés;

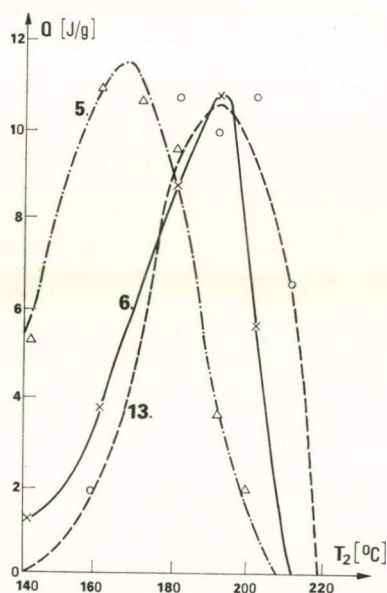
3) ha az összetétel különböző, a szerkezeti viszonyoktól függetlenül teljes reverzió után nukleálódnak csak a kiválások, nagy valószínűséggel a koncentráció fluktuációk maximumainál (AlZnMg : GP I. $\rightarrow \eta'$);

4) amennyiben a felületi vagy a feszültségi energia csökkenése dominál az átalakulásoknál, klasszikus heterogén magképződés jön létre a szemcsehatárokon, diszlokációkon vagy a zónahatárokon.

6.3. η' képződése

A korábban alkalmazott vizsgálati módszerek — az elektrondiffrakciótól eltekintve — gyakorlatilag nem tették lehetővé az η' fázis egyértelmű elválasztását más kiválástípusoktól, elektrondiffrakcióval pedig nem lehet a részecskék összmenységét mérni. Nagy sebességű DSC-módszerrel azonban AlZnMg esetében erre lehetőség van. A mérés részleteivel, ezen belül a DSC csúcsok szétválasztásának kérdésével a következő fejezetben foglalkozunk, így ott még η' -re is vissza fogunk térni, itt most csak az eredményeket ismertetjük.

A 6.4. ábrán az 5., 6. és 13. ötvözetre mutatjuk be a kiválások mennyiségével gyakorlatilag arányos bomláshőt a 3 órás végső hőke-



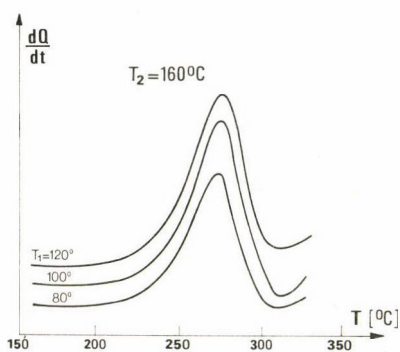
6.4. ábra. Az 5., 6. és 13. ötvözetben az η' kiválások bomláshője a 7 napos szobahőmérsékletű hevertetést és 3 órás 120 °C-os előöregítést követő 3 órás végső hőkezelés hőmérsékletének a függvényében

zelés hőmérsékletének a függvényében. A nagy diszperzitás és kiválásmennyiség elérése érdekében a mintákat előzőleg 7 napig szobahőmérsékleten hevertettük és 3 órás, 120 °C-os előőregítésnek vetettük alá.

Látható, hogy mindhárom ötvözetben képződött η' . Az 5. és 6. ötvözet esetében ez a megfigyelés ellentmond *Auld és Cousland* (1971, 1974) véleményének, amely szerint η' az $(\alpha+T)$ tartományba eső ötvözeteknél nem alakul ki.

A 6.4. ábra szerint η' maximális mennyisége alig függ az összetételtől, optimális képződési hőmérséklete kb. 180 °C. Bár 140 °C alatt nem történtek vizsgálatok, az ábrából látható, hogy a képződés alsó határa függ az összetételtől. A felső határ ugyanakkor mindhárom ötvözetre közel azonos, kb. 210 °C.

Tanulmányoztuk a közbülső hőkezelés hatását is η' képződésére. Azt már láttuk az előző szakaszban, hogy a szobahőmérsékleti hevertetés (GP zóna képződés)



6.5. ábra. A IV. ötvözet DSC diagramjai 7 napos hevertetés után különböző T_1 hőmérsékleteken 3 óráig végzett közbülső, majd 160 °C-on 3 óráig tartó végső hőkezelés után mérve

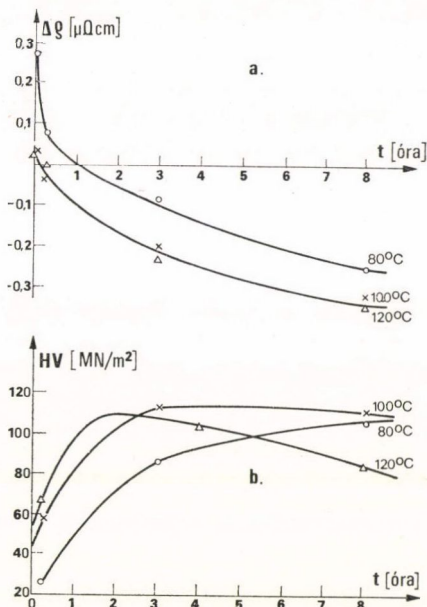
hiánya igen nagy mértékben lelassítja η' képződését. A szobahőmérsékleti hevertetés után egy magasabb, közbülső hőmérsékleten végrehajtott második hőkezelési lépcső az irodalom szerint kedvezően befolyásolja a diszperzitást. A 6.5. ábra 7 napos hevertetést követően 80, 100 és 120 °C-on végzett 3 órás közbülső hőkezelés után 160 °C-on 3 óra alatt képződött η' részecskék bomláshőjét mutatja. Mint megállapítható, ebben a gyakorlatilag fontos hőkezelési tartományban a közbülső hőkezelés hőmérséklete nem befolyásolja számottevően a képződött η' mennyiségét, a 100 és 120 °C-os görbe jó közelítéssel fedi egymást és a 80 °C-os bomláshője (görbe alatti területe) is csak valamivel kisebb a másik kettőnél. Hasonló eredményre vezetnek ellenállásméréseink is (6.6. ábra), ha figyelembe vesszük, hogy a

80 °C-on végrehajtott közbülső hőkezelés után tetemes mennyiségben vannak GPI zónák is, amik a 160 °C-os hőkezelés kezdetén revertálnak. Az ellenállással szemben a keménység (6.6/b. ábra) eltérően változik a különböző közbülső hőkezelések után, tehát a diszperzitási viszonyok máshogy alakulnak.

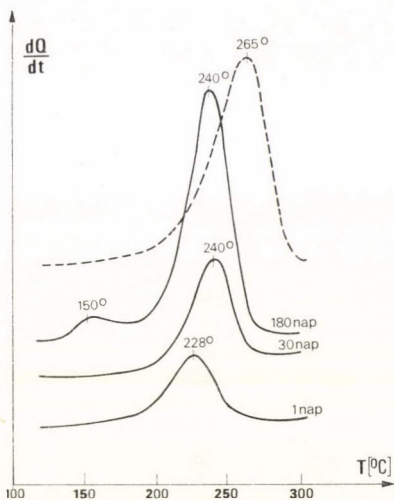
Érdekes megfigyelní, mi történik az ötvözetben, ha η' képződését egy rövid ideig tartó, megfelelő hőkezeléssel éppen csak megindítjuk, majd a mintát szobahőmérsékleten heverni hagyjuk. A szokásos előkezelés (20 °C, 7 nap+120 °C, 3 óra) után 10 percig 160 °C-on kezelt, majd különböző, maximálisan 6 hónapig tartó szobahőmérsékleti hevertetések után mért minták DSC diagramjai láthatók a 6.7. ábrán. Összehasonlításképpen berajzoltuk a 160 °C-on 8 órán át nemesített minta diagramját is, amely a 6 hónap alatt már nem mutatott változást a mérési hibán belül. Látható az ábrából, hogy a 10 percig 160 °C-on kezelt mintában szobahőmérsékleten is továbbfejlődtek az η' kiválások, ugyanakkor szobahőmérsékleti GP zónák még 180 nap alatt is csak minimális mértékben keletkeztek. A DSC csúcshőmérsékleteltolódás tanúsága szerint η' szobahőmérsékleten lejátszódó fejlődése alatt a részecskék stabilitása — valószínűleg átlagméretük növekedése miatt — nő. Szoba-

hőmérsékleten 180 nap alatt kb. ugyanannyi kiválás képződött, mint 160°C -on 3 óra alatt, az utóbbiakhoz azonban nagyobb csúcshőmérséklet tartozik.

A fentivel párhuzamosan vizsgáltuk a 160°C -on 1 órát hőkezelt minta szobahőmérsékleti továbböregezését is. Az első hónapban még ebben is tovább nőtt η' mennyisége, GP zónák pedig 180 nap alatt sem keletkeztek.



6.6. ábra. A 6. ötvözetben a fajlagos ellenállás (a) és a mikrokeménység (b) változása 7 napos hevertetés után különböző T_1 hőmérsékleteken 4 órán át végzett közbülső hőkezelést követő 160°C -os végső hőkezelés során. (A fajlagos ellenállás változását a szilárdoldat állapothoz viszonyítottuk.)



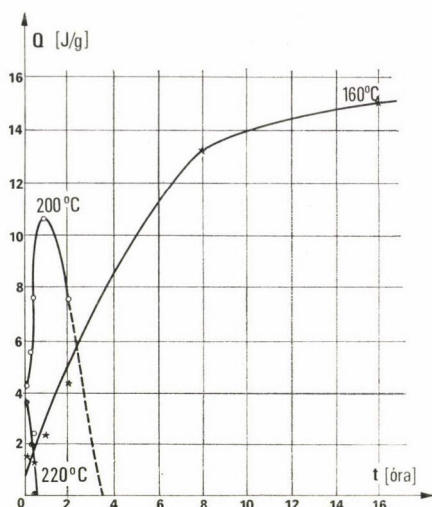
6.7. ábra. A 6. ötvözet DSC diagramjai 160°C -on 10 perces hőkezelés, majd különböző ideig tartó szobahőmérsékleti hevertetés után (kihűzött), valamint 160°C -on 8 órás hőkezelés után mért görbe (szaggatott)

A jelenség magyarázata nyilvánvalóan η' -nek a GP zónáknál nagyobb stabilitásában, de magképződésének nagyobb energiagátjában keresendő. Ha már a magok a nagyobb hőmérsékleten létrejöttek, szobahőmérsékleten is tovább nőnek.

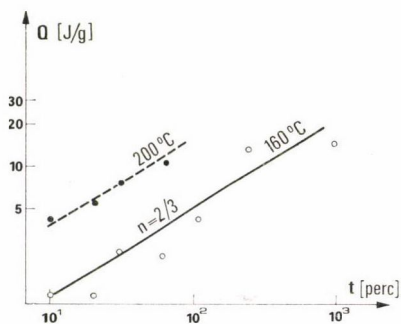
Az 5. ötvözetben DSC mérésekkel követtük (a szokásos közbülső hőkezelés: 20°C , 7 nap + 120°C , 3 óra után) különböző hőmérsékleteken η' képződésének a kinetikáját is. Az eredményeket a 6.8. ábrán láthatjuk. Megfigyelhetjük, hogy 160°C -on — ahol döntő többségben csak η' kiválások keletkeznek (lásd 7. fejezetet) — a képződés még 16 óra alatt sem megy telítésbe. 200°C -on kezdetben rohamos a növekedés, kb. 1 óra után azonban csökkenni kezd η' mennyisége. Mint a következő fejezetben látni fogjuk, ekkor erőteljesen megindul egy másik fázis kialakulása. 220°C -on eleinte még van η' — 10 perces hőkezelés után közel ugyanannyit mérünk, mint 200°C -on ugyanennyi idő után —, tehát itt még erőteljesen érzi az ötvözet az előkezelés hatását. 30 perc alatt azonban 220°C -on már minden η' ki-

válás felbomlott, 240 °C-on már 10 perces kezelés után sem jelent meg η' -csúcs a DSC-diagramon.

Vizsgáljuk meg most, hogy a képződés szakaszában η' követi-e az Avrami-típusú kinetikát. Mivel 160 °C-on nem közelítettük meg a mérési idő alatt a telítést, 200 °C-on pedig a bomlás jóval előbb kezdődik, mint ahogy a telítés elérhető lenne,



6.8. ábra. Az 5. ötvözetben az η' fázis képződési kinetikái 160–220 °C között DSC mérésekből meghatározott bomláshő alapján. (Előkezelés: 20 °C, 7 nap + 120 °C, 3 óra.)



6.9. ábra. $\log Q - \log t$ összefüggések η' képződési szakaszaira az 5. ötvözetben

a bomláshőre (3.7)-hez hasonló közelítést tételezünk fel. A 6.9. ábrából látható, hogy — bár 160 °C-on a szórás nagy — a közelítés elfogadható, az iránytangensből pedig mindkét esetben $n=2/3$ adódik, ami a növekedés során feszültségtér szerepére utal (Christian 1957).

6.4. A szennyezők hatása az η' képződésének a hőmérséklet-tartományában

Megvizsgáltuk a Si és Fe szennyezők hatását η' képződési tartományában is.

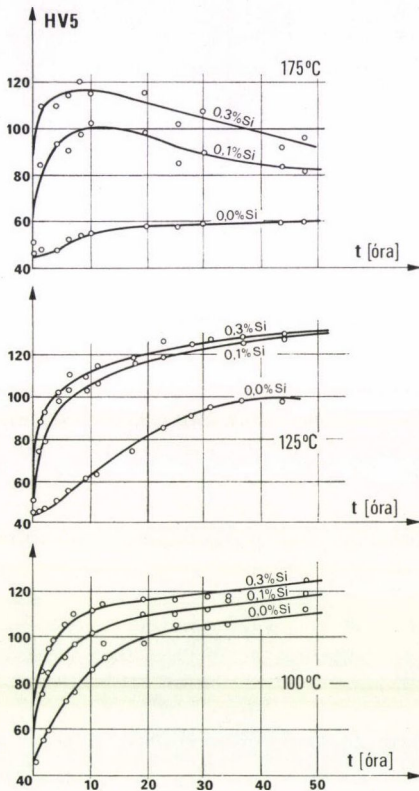
A 6.10. ábrából láthatjuk, hogy az oldott szilíciumot tartalmazó (540 °C-ról edzett) és a szilíciummentes ötvözet keménységváltozásának jellege 100 °C-on még közel azonos, 125 °C-on és felette azonban jelentősen eltér egymástól. A magasabb hőmérsékleteken a Si-men es ötvözet keményedése a hőmérséklet növekedésével egyre hosszabb inkubációval kezdődik, mértéke pedig fokozatosan csökken. A Si- tartalmú ötvözetben ezzel szemben már kezdetben nagy sebességgel indul a keményedés, mértéke a Si-tartalommal és a nemesítés hőmérsékletével nő, mindenhol felülmúlja az adalékmentes ötvözetét, 170 °C felett pedig túlöregedés is bekövetkezik.

Elősegíti a Si a fajlagos ellenállás csökkenését is a 120–160 °C-os hőmérséklettartományban. Ugyanakkor az 5. típusú ötvözetben 140 °C-ig, a 6. típusban 160 °C-ig GP zónaképződést is megfigyelünk. Hasonló jelleggel változik a fajlagos ellenállás az AlMgSi ötvözetekben is

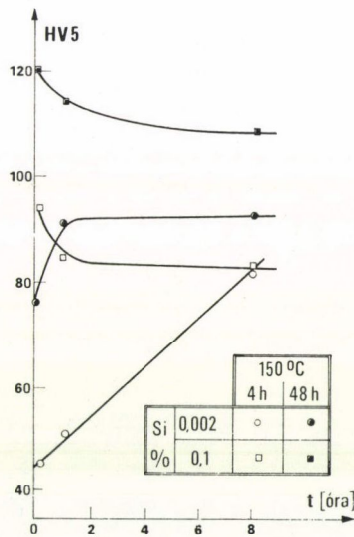
(Kovács és munkatársai 1972). Ugyancsak az AlMgSi ötvözetekre jellemző, hogy a szobahőmérsékleteken végzett közbülső hevertetés erősen lecsökkenti a 100 °C fölött elérhető keménységnövekedés mértékét (Lendvai 1978). Mint a 6.11. ábrából látható, ez a hatás is megfigyelhető az AlZnMgSi ötvözeteknél, ha az oldó hőkezelést elegendően magas hőmérsékleten végeztük (lásd 4.3. szakaszt). Amennyiben

az oldó hőkezelés alacsonyabb hőmérsékleten történt, a közbülső hőkezelés — mint általában az AlZnMg ötvözeteknél — itt is előnyös.

A fentiek alapján felvetődik a gondolat, hogy Si jelenlétében AlMgSi fázisok is kialakulnak ebben a hőmérséklet-tartományban. Ezzel szemben *Thackery és Thomas (1971)* azt állítja, hogy a Si az η' diszperzitását növeli meg, tehát a magképződésben játszik szerepet. Kaloriméteres méréseink egyértelműen bizonyították az AlMgSi-típusú átmeneti fázis számottevő képződését.



6.10. ábra. Az 5. típusú ötvözet keménységének változása különböző mennyiségű Si-adalék esetén 540 °C-ról végzett edzést követő 100, 125 és 175 °C-os öregítés során



6.11. ábra. A szobahőmérsékleti hevertetés idejének hatása Si-adalékot tartalmazó, illetve nem tartalmazó ötvözet esetén. Az oldó hőkezelés 540 °C-on történt

A vas az η' kiválások mennyiségét csak minimális mértékben befolyásolja azért, hogy az ötvözők — elsősorban a Mg — egy részét kiválások formájában leköti.

A IV. technikai tisztaságú ötvözetben a vas és a szilícium együttes hatására kaloriméteres méréseinkből megállapítottuk, hogy η' képződésének hőmérséklet-tartományát nem befolyásolják, de kb. 170 °C-ig a bomlási hő 10–30%-kal nagyobbak adódtak, mint a megfelelő nagy tisztaságú ötvözetben. Emellett itt is megfigyelhető volt az AlMgSi átmeneti fázis képződése.

6.5. η' stabilitása, utóöregedés

A stabilitás jellemzőjének tekinthetjük η' esetében is az azonos felfűtési sebesség (80 °C/perc) mellett kapott DSC csúcshőmérsékletet (T_{cs}). Az 5. ötvözet 160 °C-on különböző ideig végzett hőkezelései után mért T_{cs} értékeket mutatja az V. táblázat. Mint látható, a kezdeti, alacsony, lapos csúcsokból pontatlanul megállapítható adatoktól eltekintve T_{cs} értéke monoton növekszik az öregedés folyamán. Ez valószínűleg elsősorban a kiválások méretének a növekedésével függ össze, de a szerkezet változása is hozzájárulhat a stabilitás növekedéséhez, amire azonban az irodalomban rendelkezésre álló adatok nem tekinthetők kielégítőnek.

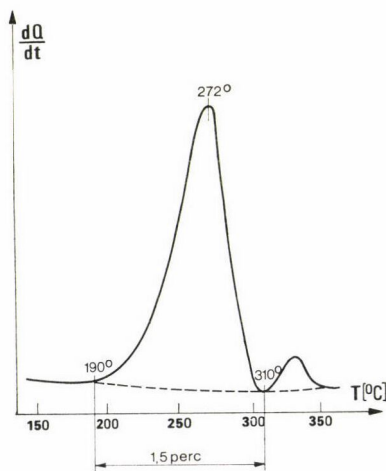
V. TÁBLÁZAT

A DSC csúcs hőmérsékletének változása az öregedési idővel az 5. ötvözet 160 °C-on végzett hőkezelése során

t (perc)	10	20	30	60	120	480	960
T_{cs} (°C)	248	241	241	252	269	272	272

6—8 óra után az V. táblázat értelmében T_{cs} már nem növekszik tovább, az η' részecskék feltehetőleg elérik metastabil szerkezetüket és méretüket.

Mint a 6.12. ábra DSC diagramjából látható, ebben az állapotban a részecskék kb. 190 °C-on kezdenek bomlani, és 80 °C/perc felfűtés mellett a bomlás 310 °C-on



6.12. ábra. Az 5. ötvözet DSC diagramja 7 napos hevertetés, 3 órás 120 °C-os, majd 8 órás 160 °C-os hőkezelés után

befejeződik. Ez azt jelenti, hogy a teljes oldódási folyamat ilyen körülmények között 1,5 perc alatt lezajszódik. Mivel hasonló felfűtési sebességek vannak a hegesztési hőigénybevételek esetén is, és egy perces nagyságrendbe esik az az idő, ami alatt a munkadarab újra lehűl szobahőmérsékletre (Buray és munkatársai 1957), 200, illetve 540 °C-os, egy perces hőlökéseknek vetettük alá a mintáinkat. A fajlagos ellenállás alakulását a három alapötvözetre a VI. táblázat mutatja.

Mint megállapítható, a 200 °C-os hőlökés mindhárom ötvözetnél csak minimális növekedést okoz a fajlagos ellenállásban, tehát az η' kiválásoknak csak igen kis hányadát oldja fel. Lényegesen nagyobb a fajlagos ellenállás növekedése az 540 °C-os hőkezelések hatására, de nem éri el teljesen a szilárdoldatoknak megfelelő értéket, tehát a bomlás ilyen rövid idő alatt még nem tökéletes. A hőlökést követő utónemesedés folyamán azonban szobahőmérsékleti hevítés során hasonlóképpen nő a fajlagos ellenállás, mint az edzés követően. Érdekes megjegyezni, hogy a bomlásra

VI. TÁBLÁZAT

Az 5., 6. és 13. ötvözetek fajlagos ellenállása ($\mu\Omega$ cm-ben)
szilárdoldat (edzett) állapotban, 7 nap hevertetés $+100^\circ\text{C}$ -on 4 órással
 $+160^\circ\text{C}$ -on 4 órással hőkezelés, továbbá az ezt követő 200°C -os,
illetve 540°C -os egy perces hőkezelések után

Állapot \ Minta	5.	6.	13.
Edzett	1,62	1,83	1,17
Hőkezelt	1,25	1,43	0,98
200°C -os hűlés után	1,27	1,45	0,99
540°C -os hűlés után	1,45	1,60	1,07

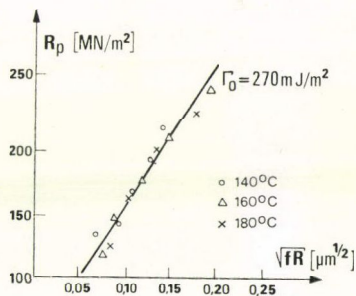
vonatkozóan a szakítóvizsgálatokból hasonló következtetéseket lehet levonni, mint az ellenállásból, azonban míg 540°C -os hűlés után 45 napos hevertetés során a folyáshatár messze alatta marad a kiindulási, hőkezelt állapoténak, a szakítószilárdság gyakorlatilag eléri azt. Mindkettő magasabb azonban, mint az edzés követő, ugyanilyen hosszú hevertetés után kapott értékek. Ez azt mutatja, hogy a két mikroszerkezet eltérő.

6.6. η' hatásai

Megvizsgáltuk az 5.2. szakaszban leírtakhoz hasonlóan az η' részecskék hatását is az alakítási görbékre. A mérésekből itt is az adódott, hogy a feszültség az egytengelyű nyújtási deformáció négyzetgyökével arányos, tehát a diszlokációk ebben az esetben is — legalábbis nagy diszperzitás esetén — a részecskék átvágása révén mozognak. A kapott $R_p - \sqrt{fR}$ összefüggést a 6.13. ábra mutatja. Ennek alapján az η' részecskék fajlagos átvágási munkája

$$\Gamma_0 = 270 \text{ mJ/m}^2.$$

η' -nek a fajlagos ellenállásra kifejtett hatását nem vizsgáltuk, mivel gyakorlatilag kicsi a jelentősége. A teljesség kedvéért azonban megemlítiük, hogy Lendvai és munkatársai (1977) elvégezték ezeket a vizsgálatokat. Azt találták, hogy az η' -nek egy részecskére eső ellenállásjárulék, ρ''/N a részecske Guinier-sugarának köbével arányos és az arányossági tényező $256 \pm 6 \text{ n}\Omega\text{cm}$.



6.13. ábra. A folyáshatár mint $(fR)^{1/2}$ függvénye a különböző módon létrehozott η' kiválásokkal nemesített III mintánál

7. Inkoherens fázisok az AlZnMg ötvözetekben

7.1. Irodalmi összefoglaló

A 2. fejezetben összefoglaló áttekintést adtunk az ötvözetrendszerben kialakuló fázisokról. Az egyensúlyi fázisdiagram meghatározásával a század első felében számos szerző foglalkozott (Fink és Willey 1924, Köster és Wolf 1936, Köster és Dullen-

kopf 1936, Siebel 1943, Butchers és munkatársai 1943, Little és munkatársai 1943, Butchers és Hume-Rothery 1945, Strawbridge és munkatársai 1945, Saulnier 1948, Saulnier és Cabane 1949, Nishimura és Murakami 1950, 1953, Hirano és Takagi 1955). A diagramoknak Mondolfo (1971) által módosított formáját a 2. ábrán be is mutatuk. Mint innen megállapítható, az alumíniumsarok közelében Zn-et és Mg-ot számottevő mennyiségben tartalmazó ötvözetekben a Zn_2Mg (η), illetve az $Mg_3Zn_3Al_2$ (T) fázis játszik szerepet. Látni fogjuk azonban, hogy a fázisdiagram menete nem tekinthető tisztázottnak.

Foglaljuk össze először e két fázisról rendelkezésünkre álló adatokat.

A $MgZn_2$ összetételű η fázis $P6_3/mmc$ típusú hexagonális szerkezet, mely az elemi cellájában 12 atomot tartalmaz és a Laves-fázisok prototípusának tekinthető. Rácsállandóinak meghatározására mind röntgen-, mind elektrondiffrakcióval több kísérlet történt. Ezeknek eredményeit a VII. táblázatban gyűjtöttük össze.

Thackery (1968) megállapította, hogy a rácsszerkezet független a mátrixon belül a kiválás orientációs viszonyaitól, ugyanakkor Gjønnes és Simensen (1970) két különböző összetételű ötvözetben eltérő rácsparamétereket kapott. Így feltehető, hogy a szerkezet függ az összetételtől. Erre utal az a megfigyelés is, hogy $Zn:Mg=1:1$ összetétel környékén a Zn-et részben Al atomok is helyettesíthetik (Schmalzried és Gerold 1958).

VII. TÁBLÁZAT

Az η fázis rácsállandóira mért adatok

Szerző	Laves és Löschberg (1934)	Tarschisch és mtsai. (1934)	Mondolfo és mtsai. (1956)	Graf (1957)	Thackery (1968)	Gjønnes és Simensen (1970)
a	5,21	5,17	5,15	5,23	5,23	5,18
c	8,60	8,50	8,48	8,57	8,59	8,59
módszer	rtg.	rtg.	rtg.	rtg.	el. diff.	el. diff.

VIII. TÁBLÁZAT

A különböző szerzők által megfigyelt orientációk

Gjønnes és Simensen (1970)		Schmalzried és Gerold (1957)	Embury és Nicholson (1965)	Thackery (1968)	Subbarao (1972)	Ryum (1975)	Mondolfo /1971/			
jelölés	orientációs kapcsolat						jelölés	térfigateltérés		
$-\eta_1$	$(10,0)_\eta \parallel (001)_\alpha, (00,1)_\eta \parallel (110)_\alpha$	I IIa IIb	+	6	+	1	g	+ 0,4		
$-\eta_2$	$(00,1)_\eta \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha, (10,0)_\eta \parallel (110)_\alpha$			5		2	e	- 26,7		
$-\eta_3$	$(00,1)_\eta \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha, (11,0)_\eta \parallel (110)_\alpha$			—		3	f	+ 3,4		
$-\eta_4$	$(00,1)_\eta \parallel (110)_\alpha, (\bar{1}2,0)_\eta \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha$			1		5	a	+ 3,7		
$-\eta_5$	$(\bar{1}2,0)_\eta \parallel (0\bar{1}\bar{1})_\alpha, (30,2)_\eta \parallel (110)_\alpha$			2			b	+ 30,0		
$-\eta_6$	$(\bar{1}2,0)_\eta \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha, (20,1)_\eta \parallel (1\bar{1}2)_\alpha$			3			i	- 17,1		
$-\eta_7$	$(\bar{1}2,0)_\eta \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha, (10,4)_\eta \parallel (110)_\alpha$			4			d	+ 11,0		
$-\eta_8$	$(\bar{1}2,0)_\eta \parallel (\bar{1}\bar{1}2)_\alpha, (00,1)_\eta \parallel (31\bar{1})_\alpha$						h	+ 8,5		
$-\eta_9$	$(\bar{1}2,0)_\eta \parallel (001)_\alpha, (00,1)_\eta \parallel (110)_\alpha$			—						

A mátrix és a kiválás között különböző orientációs kapcsolatok lehetőségére már Graf (1956) rámutatott. A lehetséges orientációs viszonyokra azóta is igen sok vizsgálat történt. Gjønnes és Simensen (1970) jelölését használva a VIII. táblázatban összegyűjtöttük az eddig közölt 9 típust, és beírtuk a többi szerző jelölését is.

Az η_1 illeszkedését a mátrixhoz Schmalzried és Gerold (1958) Mehl elve alapján magyarázza: azoknak az orientációs viszonyoknak a megvalósulása valószínűbb, amelyek a mátrixból minimális lépéssel úgy jönnek létre, hogy maximális illeszkedést biztosítanak a kiválás és a mátrix között (Geisler 1951). η_1 -et Thackery (1968) 2,5 at% Zn, 2,2 at% Mg ötvözetében 165 °C környékén lassú lehűtés után végzett 120 órás hőkezelés esetén megnyúlt nyolcszögek formájában észlelte. Ilyenkor ez az orientáció volt a döntő többségben. Gyors edzés után viszont csak ritkán fordult elő. Gjønnes és Simensennél (1970) 130 °C-on 24 óra alatt η_1 még csak nyolc-, illetve hatszögletes lemezeket képezett, Ryum (1975) a szemcsehatároknál figyelte meg az $\{100\}_\alpha$ síkokban.

η_2 — amelynek lehetőségét ugyancsak Schmalzried és Gerold (1958) tételezte fel először — Thackery (1968), valamint Gjønnes és Simensen (1970) szerint bázislapjával az $\{111\}$ síkokban fekvő, kerek vagy hatszögletes lap, amelynek éleire az alábbi áll: $\langle 11.0 \rangle_{\eta_2} \parallel \langle 112 \rangle_\alpha$. Thackery ezt csak közvetlen edzés esetén észlelte diszlokációk mentén. Gjønneséknél homogén eloszlásban is előfordult, és erős feszültségi kontrasztot mutatott. Ryumnál (1975) gyakran jelentkezett mind heterogén, mind homogén magképződéssel.

η_3 ismét Schmalzried és Geroldtól származó változat, Thackery azonban nem tudta megtalálni. Gjønnes és Simensen, valamint Ryum megfigyelte az $\{111\}_\alpha$ síkokban fekvő három-, illetve hatszög alakú lemezek formájában, de csak kevés volt belőle.

η_4 az $\langle 110 \rangle_\alpha$ irányokban, bázislapjával az $\{111\}_\alpha$ síkokon elhelyezkedő rudacska, mely mindhárom dolgozatban az egyik leggyakrabban előforduló részecske mind a mátrixban, mind a szemcsehatárokon, mind pedig a diszlokációk mentén.

η_4 variációinak tekinti Thackery η_5 , η_6 , η_7 -et, amelyek ugyancsak az $\{111\}$ síkokon helyezkednek el az $\langle 110 \rangle_\alpha$ irányokba mutató tengellyel, csak η_4 -hez képest kb. 11, 15, illetve 25°-kal el vannak forgatva. Előfordulásuk ritka, de megfigyelhetők néha olyankor is, amikor még nem nőttek rúddá, csak lapokat képeznek.

η_8 -at csak Gjønnes és Simensen észlelt rudak formájában.

η_9 -et Embury és Nicholson (1965) találta meg először és Gjønnes és Simensen szerint a lemezekéi valószínűleg a $\{001\}_\alpha$ síkokban fekszenek.

Több szerző vizsgálta az η' fázis képződési tartományát kaloriméterrel (Asano és Hirano 1968/a., b., Hirano 1974, Adler és Dealsi 1977, De Iasi és Adler 1977, Zahra és munkatársai 1979). Minden esetben jól megfigyelhető mérési diagramjaikon az η -hoz tartozó csúcs összetett jellege, ezt azonban egyik szerző sem elemzi. Kézenfekvőnek tűnik pedig a kapcsolatot a többféle orientációs lehetőséggel.

Mondolfo (1969, 1971) meghatározta az egyes orientációkra a mátrix-rácshelyekkel azonos számú atomot tartalmazó Zn_2Mg térfogatának eltérését a mátrixétól. A VIII. táblázatban ezt is feltüntettük. A nagy valószínűséggel előforduló η_4 és η_1 esetén ez az eltérés kicsi (a sorrend azonban nem egyezik az előfordulás valószínűségével). Mondolfo (1969) elsősorban ennek tulajdonítja a nagy gyakoriságukat. Felhívja azonban ő is a figyelmet arra, hogy a könnyű képződés feltételénél az atomok helye és száma az illeszkedés síkjában szintén döntő. Ezzel függhet össze η_2 viszony-

lag nagy előfordulási valószínűsége annak ellenére, hogy térfogata erősen eltér a mátrixétól. η_2 jó síkbeli atomi illeszkedését *Schmalzried* és *Gerold* (1958) valóban ki is mutatta.

Az η fázisról *Graf* (1957) azt mondja, hogy az η' -ből képződik. *Mondolfo* és *munkatársai* (1956) is felvetik a folyamatos átalakulás lehetőségét, de a szimultán képződést sem tartják lehetetlennek.

Mint említettük, *Thackery* (1968) nem talált η' -t ötvözetében, így η közvetlen nukleációját tételezte fel. *Mondolfo* (1969), valamint *Embury* és *Nicholson* (1965) ezzel szemben úgy gondolja, hogy a különböző orientációs viszonyokhoz különböző átmeneti fázis (vagy rendezett GP zóna) tartozik.

Gjønnes és *Simensen* (1970) azt találta, hogy η_2 szerkezete közel azonos η' -ével, és a két részecske között lehetséges közvetlen átalakulás. A két fázis a diffrakciós kép alapján nehezen választható szét. Alkalmas esetben azonban a megfelelő diffrakciós pont felhasználásával készült sötétlátóterű elektronmikroszkópi kép az η_2 -re speciális moiré-ábrát mutat, míg η' kontrasztja szabálytalan. A röntgendiffrakciós kép folyamatos változása alapján *Auld* és *Cousland* (1974) alátámasztottnak látja az $\eta' \rightarrow \eta_2$ átalakulást. Hasonló η_2 nukleációjáról *Ryum* (1975/a.) elképzelése is.

A T fázis szerkezetét *Laves* és *munkatársai* (1934, 1935) határozták meg, és I_{m3} típusú térben középpontos köbös rácsnak találták $a = 1,416$ nm rácsállandóval. Elemi cellájában 161 atom van. Összetételéről *Graf*nak (1956) az a véleménye, hogy az $Al_2Mg_3Zn_3$ -nak felel meg, *Rieder* (1936) szerint a Mg 20–35%, a Zn 15–22% között változhat, *Bergman* és *munkatársai* (1952) pedig az $(AlZn)_{49}Mg_{32}$ összetételt találták helyesnek. Ma ez utóbbit szokás elfogadni.

Schmalzried és *Gerold* (1958) $a = 1,415$ nm-es rácsállandót mértek, és szerintük a szerkezetben a Mg atomok száma a nagy atomrádiusz-eltérés miatt állandó kell legyen, az Al és Zn azonban helyettesíthetik egymást.

Ugyancsak *Schmalzried* és *Gerold* (1958) határozták meg először a T fázis orientációs viszonyait is. Ezt *Ryum* (1975) kiegészítette. A lehetséges orientációk:

$$(1\bar{1}0)_x \parallel (100)_T, \quad (111)_x \parallel (010)_T$$

$$(110)_x \parallel (100)_T, \quad (001)_x \parallel (011)_T$$

$$(110)_x \parallel (100)_T, \quad (1\bar{1}0)_x \parallel (025)_T$$

A T fázisszerkezete jól képes illeszkedni az Al mátrixhoz (*Schmalzried* és *Gerold* (1958), így kis felületi energiát képvisel. Ennek ellenére csak magas hőmérsékleteken képződik. Ennek az az oka, hogy a sok atomból álló elemi cella kialakulása nagy magokat igényel, amiknek a képződési valószínűsége kicsi. *Elagin* és *munkatársai* (1975) ezzel szemben úgy vélik, hogy a T fázis magjait egy átmeneti T' részecskéi képezik, és ezek már szobahőmérsékleten is létre tudnak jönni. Bár magasabb hőmérsékleteken (155 °C), de ugyancsak feltételeznek T' átmeneti fázist *Auld* és *munkatársai* (1976) is.

Graf (1956) 2,9 at % Zn, 3,3 at % Mg ötvözetében 200 °C, *Schmalzried* és *Gerold* (1958) 2,6 at % Zn, 3,8 at % Mg ötvözetben 225 °C felett észlelt T fázist a mátrixban, a szemcsehatáron azonban már 190 °C-on is találtak T részecskéket. 375 °C felett viszont már nem volt kiválás. *Ryum*nál (1975) a 2,4 at % Zn, 2,2 at % Mg összetétel esetén a T fázis 250 °C felett jelent meg közvetlen edzés esetén, 300 °C-on homogén eloszlást mutatott. 350 °C-on a mátrixban 5, a szemcsehatárokon 1 percen

belül megfigyelhető volt. 400 °C felett nem volt T -kiválás. Ha a hőkezelést szobahőmérsékletre történt edzés után végezte, azon a helyen, ahol nem voltak helikális diszlokációk, már 200 °C-on is képződött T , a diszlokációk környezetében azonban η részecskék keletkeztek. Ebből az következik, hogy a T fázis nukleációjához vakanciák kellenek.

Thackery (1968, 1971) nagy sebességgel (>50 °C/sec) lehűtött minták elektronmikroszkópi vizsgálata során egy addig ismeretlen fázis megjelenését figyelte meg. Az új X fázis részecskéi az $\{111\}_\alpha$ síkokban fekvő lemezek. Alakjuk vagy háromszög, amelynek élei az $\langle 110 \rangle_\alpha$ irányokba esnek, vagy sokszög.

Elektrondiffrakciós vizsgálatok alapján az X fázis feltehetőleg hexagonális szerkezetű, $a=0,267$ nm, $c=0,490$ nm rácsállandókkal, és valószínűleg legalább két-féle orientációs elrendezésben fordul elő. Az elemi cella méretei közel esnek a Zn rácsállandóihoz. Ennek ellenére Thackery szerint valószínűleg nem egy tiszta Zn, hanem csak egy Zn-ben gazdag szerkezettel van dolgunk.

Az X fázis képződését Thackery 1,7, illetve 2,5 at % Zn, 2,2 at % Mg ötvözetekben 135–195 °C között mind közvetlen, mind pedig szobahőmérsékletre végzett edzés után meg tudta figyelni. Az egyetlen kritérium a gyors edzés volt. Nem képződtek viszont X kiválások a vakancianyelők, pl. szemcsehatárok közelében, tehát a vakanciáknak nagy szerepük van a magképződésben. Az edzési sebességgel szemben tanúsított nagyfokú érzékenység az oka, hogy a gyakorlati esetekben X fázis nem igen fordul elő. Mindazonáltal Cornish és Day (1969), Subbarao (1971), valamint Asano és munkatársai (1976) is észlelték. Az utóbbiak azt is megállapították, hogy nukleációja független a GP zónáktól.

Az R fázisról az irodalomban csupán Lorimer (1972) tesz említést Subbarao (1971) doktori értekezése alapján. Szerkezete hexagonális, $a=0,496$ nm, $c=0,702$ nm rácsállandókkal. Részecskéi az $\langle 110 \rangle_\alpha$ irányokban erősen megnyúlt lemezek, melyeknek orientációs kapcsolata a mátrixszal:

$$(10.0)_R \parallel (110)_\alpha, \quad (00.1)_R \parallel (111)_\alpha$$

Az inkoherens fázisok képződési kinetikájára gyakorlatilag nincs adat. A közvetett módszereknél ugyanis integráltan jelentkezik a hatásuk. Gyakorlatilag lehetetlen az egyes fázisok mennyiségének a meghatározása röntgen-, illetve elektrondiffrakció alapján, és nehézkes az egyes típusok szétválasztása a kaloriméteres mérések esetében is. Adler és munkatársai (1972) kísérletet tettek ugyan az utóbbi módszerrel a kiválások térfogati hányadának a meghatározására, de csak néhány speciális állapotban.

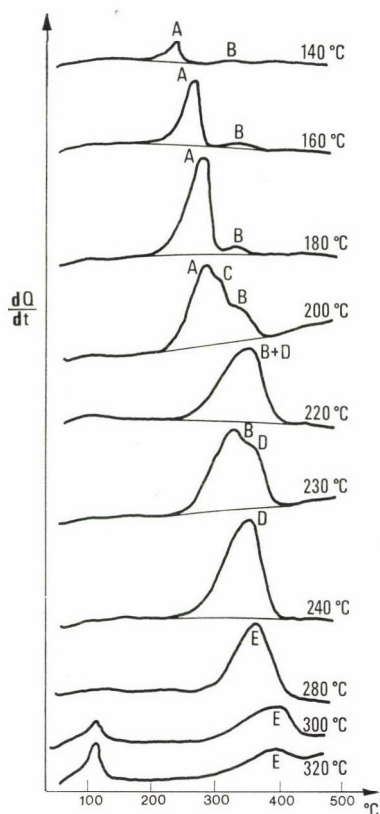
A fentiek alapján az alábbi lényegesebb kérdések merülnek fel:

- tud-e η közvetlenül η' -ből képződni,
- milyen körülmények között (összetétel, hőmérséklet, idő) képződik η ,
- milyen körülmények között alakulnak ki η különböző orientációs típusai,
- a T fázis nukleációja hogy történik,
- mi T képződési tartománya,
- mi az X fázis, és milyen körülmények között keletkezik,
- az inkoherens fázisok milyen képződési kinetikát követnek.

7.2. Kiválások képződése

DSC, elektronmikroszkópi és elektrondiffrakciós mérések alapján megkíséreltük áttekinteni a kiválások teljes képződési hőmérséklettartományát. A nagy diszperzitás érdekében mintáinkat minden esetben a 140–320 °C közé eső végső hőkezelés előtt 7 napig szobahőmérsékleten hevertettük, majd 120 °C-on 3 óráig előhőkezelésnek vetettük alá.

A korábbi DSC vizsgálatoknál (Asano és Hirano 1968-69, Hirano 1974, De Iasi és Adler 1977, Adler és De Iasi 1977, Zahra és munkatársai 1979) a szerzők 1–20 °C/perc felfűtési sebességet használtak Thomson kivételével, aki 40 °C/perc felfűtési sebességgel is végzett méréseket. Ezek a sebességek elég kicsik ahhoz, hogy a mérés során új fázisok képződjenek, és a meglévők egymásba átalakuljanak. Így nem mindig kézenfekvő a szerzőknek az a feltételezése, hogy egy adott hőkezelési állapot tanulmányozása a hőkezelt mintán és a szilárdoldatot tartalmazó edzett mintán mért diagramok összevetése alapján egyértelműen lehetséges. Az itt vizsgált AlZnMg ötvözetekben 80 °C/perc felfűtési sebességnél már nem jön létre átalakulás a meglévő fázisok között, minden kiválás közvetlenül felbomlik. Az általunk használt mérés tehát egyértelműen felvilágosítást ad a minta hőkezelt állapotáról.



7.1. ábra. A 6. számú mintán különböző hőmérsékleten végzett hőkezelés után mért DSC diagramok

A 7.1. ábra az 5. ötvözetben különböző hőmérsékleten végzett végső hőkezelés után mért DSC diagramok egy sorozatát mutatja. A végső hőkezelés időtartama 3 óra volt.

140 °C-os hőkezelésnél, ami ebben az ötvözetben közvetlenül a szobahőmérsékleten keletkezett GP zónák reverziós hőmérséklete felett van, jelentős mértékben az η' átmeneti fázis képződik (A csúcs). 160, illetve 180 °C-on η' képződése egyre gyorsabb. Mindhárom hőmérsékleten kis mennyiségben keletkezik még egy másik fázis is $T_{cs}=340$ °C körüli oldódási csúcshőmérséklettel (B csúcs).

Egyértelműen látszik, hogy 200 °C-on a DSC csúcs hármas, az A és B csúcsok között egy harmadik fázis felbomlásából származó C csúcs is megjelenik. A 7.2. ábrából látható ennek a csúcsnak a programunkkal (lásd 1. fejezetet) végzett felbontása. A digitalizált mérési adatokat \times jelzi, a szeparált, számított görbék összegét pedig \circ , abban az esetben, ha ez az összeg $\pm 2\%$ -nál nagyobb hibával tér el a digitalizált adattól. Látható, hogy az egyezés igen jó.

A 220 °C-on kapott görbe ugyancsak két csúcs összege kell legyen, és ezek egyike (D csúcs) a hozzá tartozó T_{cs} csúcshőmérséklet alapján

nem eshet egybe sem az **A**, sem a **B** csúccsal. Jól alátámasztja ezt az egyértelműen kettős 230°C -os görbe.

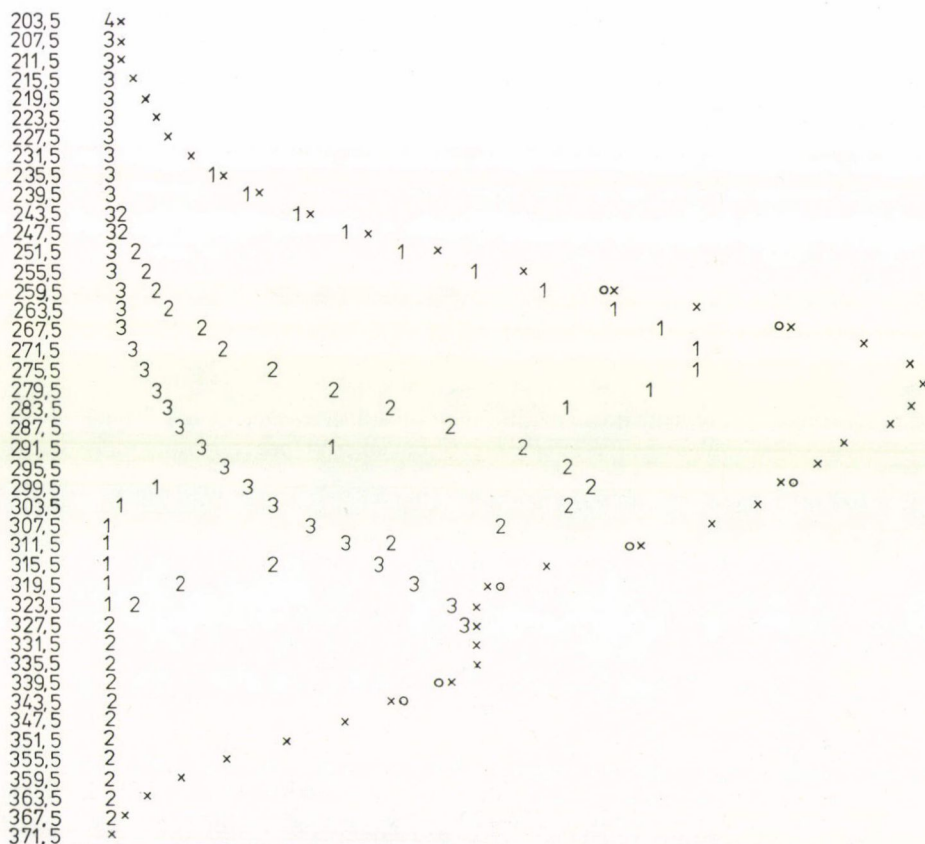
$240\text{--}250^\circ\text{C}$ között már csak a **D** csúcs jelenik meg.

$250\text{--}280^\circ\text{C}$ között a diagramok bontása nehéz.

280°C -on ismét egy határozott, egyes csúcs jelentkezik, de magasabb T_{cs} érték tartozik hozzá. Ezt az **E** csúcsot egy újabb kiválási típushoz kell rendelnünk.

280°C fölött egyre jobban ellaposodó, egyes csúcsokat kapunk, amelyek programunkkal rosszul közelíthetők egyetlen csúccsal. 2-3 csúcsos közelítésekkel kísérleteztünk, de az eredmények rendkívül bizonytalanok.

330°C -on és felette már egyáltalán nem jelent meg az **E** csúcs, csak a hőkezelés és mérés időpontja között szobahőmérsékleten képződő GP zónák bomlására utal egy csúcs $T_{cs}=130^\circ\text{C}$ környezetében. Ilyen zónaképződés az 5. ötvözetben a 280°C -on és efelett végzett hőkezelések után jött létre, ami azt mutatja, hogy itt már annyi ötvöző maradt oldatban, hogy a hőkezelés után szobahőmérsékleten lehetőségessé vált zónák képződése.



7.2. ábra. Az 1. számú mintán 200°C -os végső hőkezelés után kapott DSC diagram számítógépes feldolgozása

A IX. táblázat bemutatja a szétválasztás után kapott T_{cs} csúcshőmérsékleteket, és a csúcsok területéből meghatározott bomláshőt a végső hőkezelés T_2 hőmérsékletének függvényében. Látható, hogy a két adat változása jó lehetőséget nyújt a csúcsok típusba rendeléséhez.

IX. TÁBLÁZAT

A csúcshőmérsékletek és az 1 g mintaanyagra jutó bomláshők a végső hőkezelés hőmérsékletének a függvényében az 5. ötvözetnél

T_2	Csúcs		A		B		C		D		E	
			T_{cs} (°C)	Q (J/g)	T_{cs}	Q	T_{cs}	Q	T_{cs}	Q	T_{cs}	Q
140			254	1,3	350	+						
160			254	3,85	340	+						
180			282	8,84	346	0,25						
190			289	10,90	337	1,05						
200			272	5,66	331	4,27	299	3,90				
210					330	6,20	286	8,38				
220					332	9,49			365	3,00		
230					326	5,78			361	8,34		
240									358	16,13		
250									348	14,5		
260									348	10,43	373	3,31
270									347	3,98	374	8,30
280											370	11,19
290											415	6,16
300											410	6,24
320											400	3,06

A 7.3. ábra a IX. táblázat alapján az oldódási hőt mutatja a hőkezelés hőmérsékletének függvényében az 5. ötvözetnél. Nagyon valószínű, hogy az *A* és *B* görbékhez hasonlóan a többi sem indul az ábrán berajzolt módon meredeken, a megfelelő kis DSC csúcsok leválasztása azonban azért nem sikerült, mert a szomszédos nagyok elfedik őket.

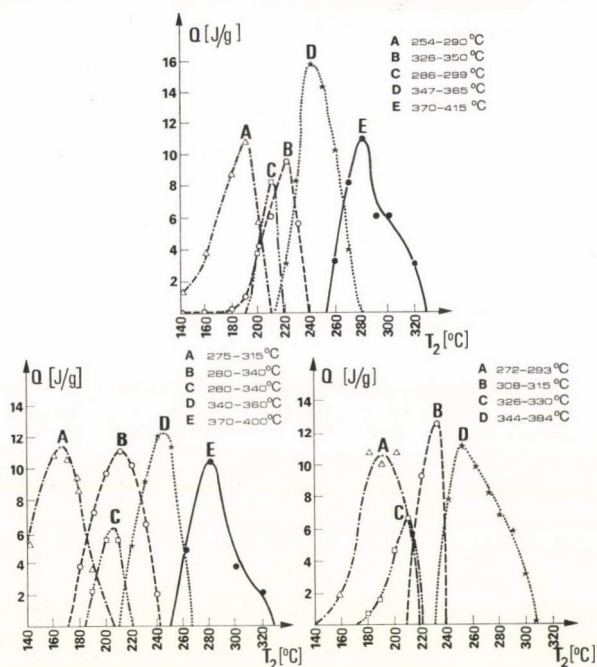
A technikai tisztaságú IV. sz. minták vizsgálata során, a 6.4. szakaszban említett eltéréstől eltekintve, hasonló eredményekre jutottunk.

A 6. ötvözetnél a 7.3. ábra értelmében az egyes csúcsok körülbelül ugyanabban a hőmérséklet-tartományban alakulnak ki, mint az 5-nél, de arányuk eltér. A *B* és *C* csúcsok szeparálása ennél az ötvözetnél nehezebb volt. A szobahőmérsékleten képződő GP zónák itt már 240 °C-os hőkezelés után megjelentek.

A 13. ötvözetben — mint az ugyancsak a 7.3. ábrából látható — a fázisképződés erősen különbözik a másik kettőtől. Ebben 140 °C-on még nem indul meg az átmeneti fázis kialakulása, csak GP zónák vannak. A csúcshőmérsékletekből arra lehet következtetni, hogy itt a hőmérséklet növelésével először a *C* csúcs jelenik meg kb. 180 °C-on végzett hőkezelés után, a *B*-hez tartozó fázis 3 óra alatt csak 220 °C-on kezd képződni. Széles hőmérséklet-tartományban, 210—310 °C között keletkezik a *D* csúcsot szolgáltató kiválás. Nem alakul ki ezzel szemben az *E* típusú csúcs, vagy ha igen, olyan kicsi, hogy a *D* csúcs elfedi. 310 °C-on és efelett — szemben a másik két ötvözetrel — itt semmilyen második fázis nem képződik.

A 6. fejezet értelmében a legalacsonyabb végső hőkezelési hőmérsékleteken jelentkező A csúcsot az η' átmeneti fázissal kell azonosítanunk.

A 13. típusú ötvözetben az irodalomban elfogadott fázisdiagram értelmében az η -n kívül magasabb hőmérsékleteken csak η fázis keletkezik (Mondolfo 1971),



7.3. ábra. Az 5., 6. és 13. számú minta egy grammjának bomláshője a végső hőkezelés hőmérsékletének függvényében

a többiben ezenkívül még a T fázis is. A Thackery (1968) által javasolt X fázistól itt most eltekinthetünk, mert az csak nagy sebességű edzések után alakul ki számottevő mennyiségben. A fentiekkel ellentétben a 13. sz. ötvözetben 160 °C felett az A csúcson kívül még további három, az 5., 6. és IV. sz. ötvözetekben pedig további négy csúcs jelentkezik. Ezek közül az E csúcsot a fázisdiagram (2.1. ábra) alapján joggal rendelhetjük a nagy hőmérsékleten stabil T fázishoz. A maradék három csúcs mindegyikének az η fázishoz kell tartoznia.

Mint a 7.1. szakaszban említettük, három különböző orientációval fordul elő az η fázis nagy gyakorisággal. Valószínű, hogy a három elváló csúcs a három gyakori orientációs viszonyhoz tartozik. (Meg kell itt említsük, hogy a 7.3. ábrán bejelölt csúcsokon kívül esetenként jelentkeztek olyan kis csúcsok is, amelyek a kimutathatósági határ közelébe estek.)

A fentiek alátámasztására becsüljük meg, milyen csúcscsúcsokat várhatunk a DSC diagramokon az egyes η fázisok orientációeltérése következtében.

In situ elektronmikroszkópi vizsgálatainkból fogjuk látni, hogy pl. 240 °C-on a kialakult gömb alakú η részecskék átmérője először kb. 30 nm-ig nő, majd a kivá-

lások zöme ennek a méretnek az elérése után felbomlik, és egy új típusú η részecske figyelhető meg, amely kb. 150 nm átmérőjű, 20 nm vastagságú tárcsákká képes növekedni. Figyelembe véve, hogy a hexagonális η fázis rácsállandói: $a=0,52$ nm, $c=0,86$ nm és az elemi cellában 12 atom van, a maximális méretű gömbkiválás kb. $8,4 \cdot 10^5$ atomot tartalmaz. Adler és munkatársai (1972) 52,8 KJ/mol képződési energiával számolnak a Zn_2Mg fázis esetén, ami $2,8 \cdot 10^{-20}$ J/atom átlagos képződési energiának felel meg. Egy gömb alakú η részecske bomlásakor tehát a térfogati szabad energia $2,4 \cdot 10^{-14}$ J-lal változik. Fázishatárok fajlagos felületi energiája $0,1$ J/m² körüli érték szokott lenni, ami az említett maximális sugarú gömbkiválásokra $2,8 \cdot 10^{-15}$ J-t ad. Ez kb. 12%-a a térfogati energiának. Amennyiben a gömbkiválás helyét a maximális méretű tárcsa foglalja el, a felület/térfogat arány mindössze $5/8$ -os tényezővel romlik.

Thackery (1968) megállapította, hogy az η fázis rácsszerkezete független az orientációs viszonyaitól. Így a szabadenergia térfogati részének is függetlennek kell lennie tőle. A határfelületen az atomok elrendeződése viszont a három leggyakrabban előforduló orientációs viszonynál meglehetősen különböző, η_2 -nél pedig még a térfogati eltérés is nagy. Így joggal feltételezhetjük, hogy az egyes fázishatárok felületi energiájában jelentős különbségek vannak.

Látni fogjuk a következő szakaszban, hogy a fázisok bomlása elsőrendű kinetikát követ, tehát az elbomlott x hányad az alábbi differenciálegyenlettel írható le:

$$\frac{dx}{dt} = A \exp(-E/RT) \cdot (1-x). \quad (7.1)$$

Ez időben lineáris hőmérséklet-növekedés esetén igen jó közelítésben (Várhegyi 1978) helyettesíthető az alábbi algebrai egyenlettel:

$$F(x) = C - E/RT - 2 \ln(E/RT) + \ln E, \quad (7.2)$$

ahol $F(x)$ egy monoton függvény, C pedig konstans. Elsőrendű kinetika esetén a DSC görbék maximuma az $x=0,6$ értéknél jelentkezik.

Nézzük meg, hogyan tolódik el ez a maximum, ha E -t valamilyen ΔE -vel megváltoztatjuk? Ilyenkor fenn kell állnia a

$$\Delta(E/RT) + 2\Delta \ln(E/RT) = \Delta \ln E \quad (7.3)$$

összefüggésnek. Mivel a logaritmus függvény lassabban változik, mint a lineáris, így (7.3) azt jelenti, hogy

$$\Delta(E/RT) \approx 0. \quad (7.4)$$

A csúcs tehát úgy tolódik el, hogy közben E/T közel állandó marad. Méréseinknél (lásd IX. táblázatot) a 600 K környezetében észlelt 20–60 K csúcshőmérséklet-eltérés így 3-8% változásnak felel meg E -ben, ami elképzelhető, hogy a felületi energia-eltérésekből adódik.

Látható a 7.3. ábrából, hogy az 5. és 6. ötvözetben, ahol T a stabil fázis, az η kiválásokhoz tartozó három csúcs kb. ugyanazokban a hőmérséklet-tartományokban alakul ki: a **B** típus 170-240 °C, a **C** 190-220 °C, a **D** pedig 210-270 °C között, az egyes kiválástípusok maximális mennyisége azonban függ az összetételtől. A 13. mintában, amelyben T nem képződik, és így η a magas hőmérsékleten stabil fázis, a **C** csúcshoz tartozó η -változat tud a legalacsonyabb hőmérsékleten

képződni, csak ezt követi a **B** típusú csúcs megjelenése. Felső határhőmérsékletük azonban megegyezik a másik két ötvözetnél kapott értékekkel. A **D** csúcsnak megfelelő η típusnak ezzel szemben az alsó határhőmérséklete esik egybe a másik két ötvözet azonos orientációjú kiválásával, felső határa azonban 300°C -ig terjed. 310°C -on már ebben az ötvözetben egyáltalán nem észleltük második fázis képződését.

Schmalzried és Gerold (1978) szerint az η_1 illeszkedik legjobban a mátrixhoz, valószínűleg tehát ez tud legkisebb képződési aktiválási energiával, tehát legalacsonyabb hőmérsékleten létrejönni. Ehhez rendelhető tehát a **B** csúcs. Mint azt a 7.1. és 7.2 ábra demonstrálja, az átmeneti fázishoz tartozó **A** csúcs egy éles, vele együtt jelentkező **B** csúcstól jól szeparálható csúcs. Ez arra enged következtetni, hogy η_1 nem keletkezhet az η' folyamatos átalakulása révén.

A bomlási hőmérséklet szerint a **C** csúcshoz tartozó η részecske a legkevésbé stabil. Feltehetőleg itt van tehát a legnagyobb szerepe a fázishatár energiájának. Valószínűleg tehát ez a legnagyobb térfogati eltérést mutató orientációs típus: η_2 . Mivel a képződési tartományban a csúcsok mindig átlapolnak, a DSC vizsgálatokból nem lehet egyértelműen eldönteni, van-e közvetlen $\eta' \rightarrow \eta_2$ átalakulás.

η_4 az irodalom egybehangzó véleménye értelmében (Thackery 1968, Gjønnes és Simensen 1970, Ryum 1975) a legnagyobb valószínűséggel előforduló, legstabilabb, pálcika alakú részecske. Így feltehetőleg ehhez a fázishoz rendelhető a **D** csúcs.

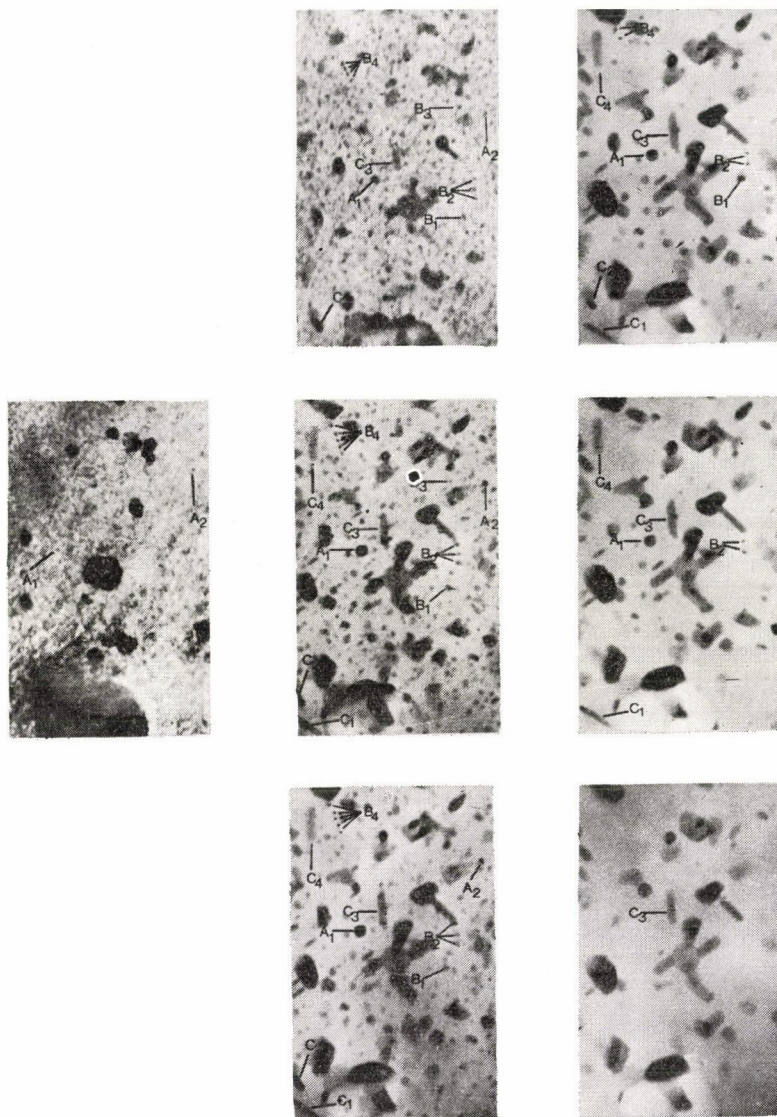
260°C felett az 5., 6. és IV. ötvözetben a **T** fázis dominál. A kiválások mérete néhány száz nm. Ryum (1975) ennél a fázisnál 3 különböző orientációviszonyt ír le. Mivel azonban a nagy kiválméreteket következtében a felületi szabadenergia jóval kisebb a térfogatnál, és **T** rácsa is jól illeszkedik az alumínium mátrixhoz (Schmalzried és Gerold 1978), az előbbi változásai az orientációs viszonytal a kaloriméteres méréseknél már nem eredményeznek elválasztható csúcst. Mint említettük, a **T** fázishoz tartozó csúcs valóban mindig elmosódott. A többféle orientáció-változatra utal azonban a 7.3. ábrán a **T** fázis görbéjének leszálló ágán az inflexió is.

A különböző η -változatok fejlődésének tanulmányozása érdekében in situ elektronmikroszkópi vizsgálatokat végeztünk. Ehhez a kiindulási állapotban a IV. ötvözetből készült mintát a szokásos előkezelés után 160°C -os hőkezelésnek vetettük alá, így az gyakorlatilag csak η' részecskéket tartalmazott. Az elektronmikroszkópban a hőkezelés az első lépcsőben kb. $240\text{--}250^\circ\text{C}$ -on történt. Mivel a vizsgált minta vastagsága $300\text{--}400\text{ }\mu\text{m}$ volt, feltehető, hogy a nemesedési folyamat hasonlóan játszódott le, mint a tömbszerű anyagban, legfeljebb esetleg a kinetikai paraméterek tértek el. Néhány állapotról készült felvételt mutat a 7.4. ábra. A felfűtés kb. 10 perccel vett igénybe, az egyensúly beálltának megfelelő állapotot jelöltük 0 perccel. A felfűtés alatt már tetemes részecskedúsulás lépett fel.

Az ábrán kétféle kiválási-típus dominál: gömb- vagy sokszögű idomok, illetve pálcikák. Az előbbieket mindegyike megtalálható már a hőmérsékleti egyensúly beálltánál elején. Ezek közül néhányat **A**, illetve **B** betűvel jelöltünk. Ezek a fentiek szerint valószínűleg η_1 és/vagy η_2 részecskéi. A kiindulási állapotban közülük csak az **A**₁ és **A**₂ részecske elődjét lehet azonosítani, amelyek az átlagnál nagyobbak. Mivel az in situ vizsgálatnál diffrakciós kép felvételére nincs mód, nem dönthető el egyértelműen, hogy ez az $\eta' \rightarrow \eta$ átnövés bizonyítékként tekinthető-e vagy sem (bár ez nagyon valószínű), és ha igen, milyen orientációs elrendezéshez tartoznak az átnövés keletkezett kiválások.

Az izoterm hőkezelés során az **A** és **B** típusú részecskék növekszenek egymás rovására, így számuk csökken, a megjelöltek közül a 67 perctől már csak **A₁** és **B₂** két alsó részecskéje éri meg. A maximális méretük kb. 30 nm.

A **C** típusú pálcikák részben már a hőkezelés kezdetére kialakultak (**C₂**, **C₃**), részben gömb alakúakból képződtek (**C₄**), részben pedig a hőkezelés során nukleálód-



7.4. ábra. A IV. ötvözetben 7 nap, 20 °C+3 óra, 120 °C+3 óra, 160 °C hőkezelés után kb. 240 °C-on végrehajtott in situ elektronmikroszkópi vizsgálat néhány állapotáról készült felvétel

tak (C_1). Hőkezelésünk végére már ezek a részecskék tették ki a kiválások zömét. Alakjuk után ítélve a pálcikák valószínűleg jórészt η_4 típusúak, de előfordulhatnak köztük η_{5-7} részecskék is.

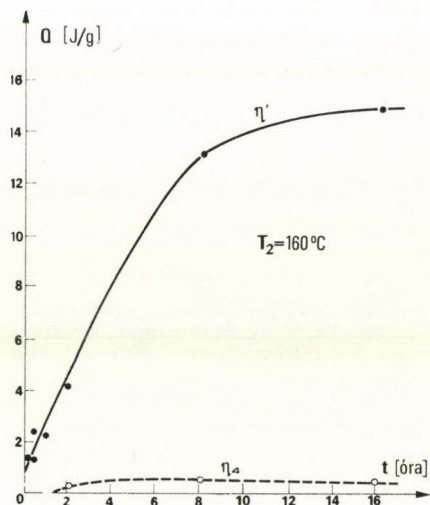
67 perc után a minta hőmérsékletét 270–280 °C-ra növeltük. Ekkor 15 perc alatt a pálcá alakú η részecskék egy része is felbomlott (a jelzettek közül csak C_3 maradt). Ezenkívül néhány igen durva részecskét lehet a felvételen megfigyelni, amely még 300 °C-on is fenn tudott maradni. Ezek feltehetőleg T-típusú kiválások. Elődjeik már 250 °C-on is megvoltak.

A pálcika alakú η részecskék maximális hossza kb. 150 nm, vastagságuk kb. 20 nm.

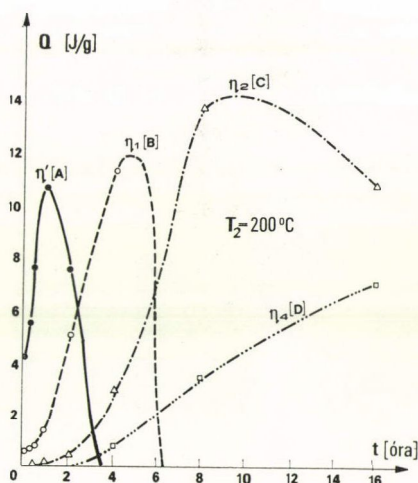
Kvantitatív kinetika vizsgálatokat is végeztünk az 5. ötvözetben DSC-vel. A mintákat előzőleg a szokásos módon mindig szobahőmérsékleten 7 napig hevertettük, majd 3 óráig 120 °C-os előhőkezelésnek vetettük alá.

160 °C-on η' mellett csak kevés η_4 képződik (lásd 7.5. ábrát), ami 2 óra után mutatott értékelhető csúcsot (B csúcs). Mennyisége 16 óra alatt sem nőtt számottevően, bomláshője az η' -höz tartozó értéknek mindössze 5–7 %-át tette ki

200 °C-on a fázisképződés rendkívül összetett (7.6. ábra). Kezdetben még itt is η' képződik nagy sebességgel, vele párhuzamosan csak egy kevés η_1 . η' mennyisége egy óra után erősen csökkenni kezd, nyilvánvalóan ennek rovására keletkezik egyre



7.5. ábra. Az 5. ötvözetben a különböző kiválások képződési kinetikája 160 °C-on, 7 napig 20 °C-on + 3 óráig 120 °C-on végzett előkezelés után



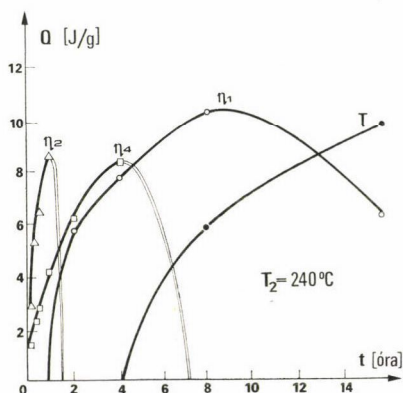
7.6. ábra. Az 5. ötvözetben a különböző kiválások képződési kinetikája 200 °C-on, 7 napig 20 °C-on + 3 óráig 120 °C-on végzett előkezelés után

több η_1 . Közben azonban már kb. fél óra eltelte után megjelenik az η_2 fázis is. η_1 négy óra után bomlani kezd, miközben η_2 növekedése erősödik fel, de ugyancsak kialakul az η_4 -hez tartozó csúcs is, mégpedig kb. akkor, amikor η_1 bomlása megindul. Hosszú idő, mintegy nyolc óra után, η_2 mennyisége is csökkenni kezd, és helyette is η_4 keletkezik.

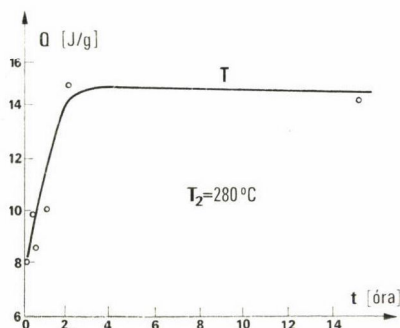
220 °C-on kezdetben (10 perc után) η' mellett η_1 és η_2 van az ötvözetben. 30 perc után η_2 -höz mintegy 10 J/g, η_1 -hez 7 J/g bomláshő tartozik, ami telítődési értékek tűnik, mivel a 16 órás hőkezelésen belül nem változott. Meg kell azonban jegyezzük, hogy η_1 és η_4 bomlása igen közeli hőmérséklet-tartományban játszódik, így a 30 percnél hosszabb hőkezelésekhez tartozó DSC-diagramok bontása bizonytalan. Valószínű, hogy hosszú idő után η_4 is képződik 220 °C-on is.

240 °C-on — mint a 7.7. ábrából látható — az előkezelés alatt képződött η' kiválások helyett már 10 perc alatt η_2 részecskék jönnek létre, és velük párhuzamosan a legstabilabb η orientációs típus, az η_4 . Ennél a hőmérsékletnél η_1 tetemesebb mennyiségben csak 2 óra után jelentkezett. Nincs azonban kizárva, hogy már előbb is kialakult, csak a DSC-diagramon a kétoldalára eső, nagy η_2 és η_4 csúcsok akkor még elnyomják. η_4 kb. addig tud fennmaradni, amíg a T fázis nem képződik.

A 280 °C-os kinetikát a 7.8. ábra mutatja: ezen a hőmérsékleten már csak a T fázis keletkezik az 5. ötvözetben, és a kiválások mennyisége 2 óra alatt telítésbe megy.



7.7. ábra. Az 5. ötvözetben a különböző kiválások képződési kinetikája 240 °C-on, 7 napig 20 °C-on + 3 óráig 120 °C-on végzett előkezelés után



7.8. ábra. Az 5. ötvözetben a különböző kiválások képződési kinetikája 280 °C-on, 7 napig 20 °C-on + 3 óráig 120 °C-on végzett előkezelés után

Mint a fentiekből látható, 200–240 °C között az η_2 fázis η' eltűnésével egy időben jelentkezik, így nem kizárt, hogy η' -ből jön létre, bár ezt a mi vizsgálataink sem bizonyítják. η_2 legnagyobb mennyiségben 200 °C környezetében képződik, magasabb hőmérsékleten viszonylag rövid idő után elbomlik.

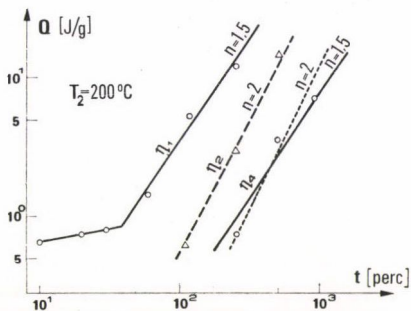
η_4 , a legnagyobb stabilitású változat, az (α +T) típusú ötvözetekben kb. 200–280 °C között tud kialakulni, és úgy tűnik, hogy mennyisége a hozzá igen közel eső felületi energiával rendelkező η_1 -gyel egyensúlyt tart mindaddig, amíg az ötvözetben a magas hőmérsékleten legstabilabb T fázis fel nem emészti

A T fázis képződése 16 órán belül csak 240 °C-on kezd megindulni, 280 °C-on viszont már ez az egyetlen kialakuló fázis, és 2 óra alatt eléri telítési értékét.

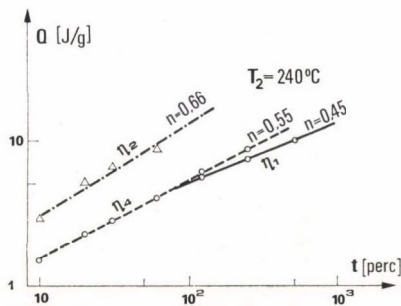
Megvizsgáltuk, hogy a különböző kiválások képződési szakasza mennyire írható le Avrami-típusú kinetikával. Mivel a bomlás miatt a telítési értéket általában nem

közelítik meg, a bomláshőről feltételeztük, hogy arra a (3.7) típusú közelítés alkalmazható.

A 200 °C-on kialakuló három különböző η fázis kinetikáját logaritmikus lépésekben a 7.9. ábrán láthatjuk. η_1 esetében jól megkülönböztethető a mintegy 40 percig tartó nukleációs periódus és a növekedési szakasz, amelyben $n=1,5$ jó közelítésnek tűnik. Ez konstans számú mag növekedésére utal (Christian 1975). η_2 -nél a mintegy másfél óras magképződés után — ami kb. egybeesik η' képződésének a periódusával — jó közelítést jelent az $n=2$ érték, ami azt mutatja, hogy — bár csökkenő mértékben — kb. nyolc óráig még ilyenkor is keletkeznek magok. Nyolc óra után viszont fokozatosan csökken η_2 mennyisége. η_4 számottevő mennyiségben η_1 bom-



7.9. ábra. A különböző típusú η kiválások $\log Q - \log t$ függvényei 200 °C-os hőkezelések esetén



7.10. ábra. A különböző típusú η kiválások $\log Q - \log t$ függvényei 240 °C-os hőkezelések esetén

lásával egyidőben kezd képződni. A róla rendelkezésre álló kevés mérési pont alapján feltehető, hogy az időegység alatt képződő magok száma egyre csökken, majd végül leáll a nukleáció.

240 °C-on a 7.10. ábra értelmében η_2 kinetikájához $n=2/3$ kitevő tartozik, így valószínűleg feszültségtérben lejátszódó növekedéssel állunk szemben. Említettük, hogy Gjønnes és Simensen (1970) ekörül a kiválás körül elektronmikroszkóppal feszültségkontrasztot észlelt. Nem világos a felvételeiből, hogy vajon honnan származik ez a feszültség. A másik két η változatnál $n \approx 0,5$, ami nagyméretű részecskék erősen akadályozott növekedésére utal. Elektronmikroszkópi megfigyelések szerint itt már valóban többszáz nm-es kiválások alakulnak ki az ötvözetben. A T fázis növekedésére kevés mérési eredmény áll rendelkezésünkre ahhoz, hogy a kinetika jellegetre következtetni tudjunk belőle.

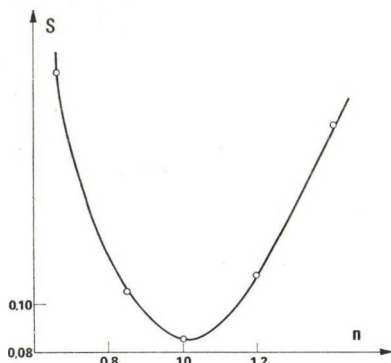
7.3. A kiválások bomlása

Mint a zónák és az átmeneti fázis esetében tettük, a kiválásoknál is jellemezhetjük az egyes típusok stabilitását a 80 °C/perc felfűtési sebesség mellett kapott bomlási csúcs hőmérsékletével. Ezeket a T_{cs} értékeket a IX. táblázat mutatja. A különböző kiválástípusok közti eltérések a szerkezetkülönbség alapján érthetők, az orientációkülönbségek hatását pedig az előbbi szakaszban tárgyaltuk. Nyilvánvaló, hogy a kisebb méretű η részecskéknél a méreteloszlás és az átlagméret is befolyásolja T_{cs} értékét.

Feltűnő a IX. táblázatban a T fázishoz tartozó E csúcshőmérsékletében megfigyelhető ugrás. A 7.3. ábrával összevetve az adatokat, ez éppen az E csúcs görbéjének inflexiójával függ össze, ami ugyan csak azt sugallja, hogy a T fázison belül több típus létezik.

A DSC diagramok értékelésére kidolgozott módszerünk lehetőséget nyújt arra is, hogy meghatározzuk a fázisok bomlási kinetikájának a jellegét. Az egyes fázisok mennyisége a bomlás folyamán feltehetőleg a

$$\frac{dx_j}{dt} = A_j \exp \left\{ -\frac{E_j}{kT} \right\} (1 - x_j)^{n_j} \quad (7.5)$$



7.11. ábra. A négyzetes hibaösszeg változása a reakció rendjével egy jellegzetes egyes csúcs esetén

jellegzetes esetre a 7.11. ábra mutatja. Ennek alapján $n=1$ az optimális közelítés. Ugyanezt sugallja a bomlágörbék alakja is. Az $n=1$ érték egyaránt megfelelő az η' és az összes η fázisra. Mint említettük, a T fázis csúcsának értékelése nehézségeket okozott.

összefüggésnek megfelelően változik. Jól elkülönülő egyes csúcsok esetén elvégeztük a programunkkal a görbe közelítést különböző n_j értékekre, és meghatároztuk az eltérések négyzetösszegét. Az eredményt egy

8. Összefoglalás

A dolgozatban beszámoltunk a nemesíthető, közepes szilárdságú AlZnMg ötvözetek (0,5–2,5 at % Zn, 0,5–3,5 at % Mg) fázisátalakulásainak tanulmányozása terén elért eredményeinkről. A vizsgálatok szobahőmérséklet és a stabil fázis képződésének felső határa, kb. 330 °C között történtek. Fontosabb megállapításainkat az alábbiakban foglalhatjuk össze:

Szobahőmérsékleten és környezetében (kb. 60 °C-ig) a Guinier—Preston zónák képződése három szakaszban történik. Az első, 30–100 percig tartó periódusban mind a Zn-, mind a Mg-atomok mozognak, a vakanciartalom és a Zn mennyiségének a növelése gyorsítja a folyamatot, az aktiválási energiát azonban elsősorban a Mg mozgása szabja meg. Ezek figyelembevételével ismertettünk egy lehetséges modellt a zónák magképződésére.

A második, átmeneti szakaszban a Zn mozgása dominál. A többletvakanciáknak még itt is van szerepük. A harmadik periódusban a végleges összetételű zónák nőnek, meglehetősen lassan. Ez a folyamat már nem függ az edzéskor bevitt vakanciák számától.

Szobahőmérsékleten kialakult metastabil állapotban a zónák mennyiségét a fenti koncentráció-tartományban az ötvözet Zn-tartalma határozza meg: a zónákon belül a Zn-koncentráció 42,2 at %, a mátrixban 0,74 % marad oldva. A Mg-koncentrációk a Zn/Mg aránytól függenek, legalább 0,24 at % Mg mindig oldott állapotban marad, a zónákban pedig az igen kicsi, illetve nagy Zn/Mg arányt tartalmazó ötvözetektől eltekintve, a Zn/Mg ≈ 1 jó közelítés. A pontos összetételeket a II. táblázat tartalmazza.

Kaloriméteres méréseinkkel egyértelműen igazoltuk, hogy magasabb hőmérsékleteken, összetételtől függően kb. $80\text{--}150^\circ\text{C}$ között, egy eltérő típusú, GP II. zóna alakul ki, amely hosszú idő alatt, illetve a hőmérséklet növelésével valószínűleg átnő η' -be. Kb. $80\text{--}120^\circ\text{C}$ között a két zónatípus egyszerre képződik.

A szilícium-szennyező, amennyiben elég magas hőmérsékleten végzett oldó hőkezeléssel oldatba vittük, a ZnMg zónákkal párhuzamosan MgSi -típusú zónákat is képez. Ezek tetemes szilárdságnövekedést okoznak, különösen olyan ötvözetekben, amelyekben a ZnMg zónák igényéhez képest sok a többletmagnézium. A Si jelenléte lényegesen lelassítja a ZnMg zónaképződés első két szakaszát.

A vas — ellentétben a Si-mal — gyorsítja az első két periódust, feltehetőleg a magképződésben játszik szerepet.

Mindkét szennyező külön-külön kissé csökkenti a ZnMg zónák mennyiségét az ötvözők — elsősorban a Mg — egy részének a lekötésével. A technikai tisztaságú ötvözetekben azonban, ahol együtt fordulnak elő, a magas oldódási hőmérséklettel rendelkező AlFeSi fázisok képződése következtében hatásuk kevésbé érvényesül. A zónák magképződési szakasza azonban itt is lényegesen hosszabb, mint a nagy tisztaságú ötvözetekben.

A szobahőmérsékleten keletkezett zónák Ostwald-érésnek indulnak, ha a minta hőmérsékletét kb. $80\text{--}110^\circ\text{C}$ közé emeljük. Ennél magasabb hőmérsékleteken egyre erőteljesebb lesz a zónák bomlása, amíg el nem érünk egy kritikus hőmérsékletet, amelyen mind a kisszögű röntgen szórás, mind a fajlagos ellenállás teljes reverziót mutat. A reverziós hőmérséklet $120\text{--}160^\circ\text{C}$ közé esik, értékét elsődlegesen az ötvözet Zn-koncentrációja szabja meg, a Mg-tartalom csak kismértékben befolyásolja. A zónán belül a Zn meghatározó szerepére mutat az is, hogy a zónák bomláshője összetételüktől függetlenül csak a Zn-koncentrációtól függ.

A reverzió aktiválási energiája $1,06 \pm 0,1$ eV, tehát valamivel kisebb, mint az ötvözők diffúziós aktiválási energiája. Valószínűleg a zónákhoz vakanciák kötődnek és ezek gyorsítják a bomlást.

Úgy tűnik, hogy a szilícium a ZnMg -zónák reverziós hőmérsékletét alig befolyásolja. Ennek eldöntése azonban nehéz, mert a párhuzamosan képződő MgSi -típusú zónák nem revertálnak. A vasszennyezés is csak kisebb mértékben növeli T_{GP} értékét, mint azt *Thackery* és *Thomas* (1971) vélte.

A reverziót követően az ötvözetek — amennyiben a revertáló hőkezelés alatt más fázisok képződése nem indult meg — tökéletesen újraöregednek. Az újraöregedés sebessége azonban, különösen a folyamat elején, lényegesen lassúbb az eredetinel. Ez szintén a vakancia-tartalommal függ össze.

A GP II. zónák nem revertálnak, ami alátámasztja azt a feltevést, hogy folyamatosan nőnek át η' -be.

Meghatároztuk a szobahőmérsékleten képződött GP zónák hatását a fajlagos ellenállásra és a mechanikai tulajdonságokra. Az öregedés folyamán — legalábbis a részletesen vizsgált $1,5 \text{ at } \% \text{ Zn-}2,8 \text{ at } \% \text{ Mg}$ összetételű ötvözetben — a fajlagos ellenállás a térfogati hányad $\frac{2}{3}$ -ik hatványával arányosan nő. Ez azt mutatja, hogy a zónák összeresztmetszete szabja meg ellenállás-járulékukat. Természetesen nem érvényes ez az összefüggés a nukleációs szakaszban, viszont helytálló az Ostwald-érés idején.

Az ötvözetek fajlagos ellenállása ebben a koncentráció-tartományban az alumínium fajlagos ellenállásának, valamint az oldatban levő ötvözők és a zónák ellen-

állás-járulékanak lineáris kombinációja. Az utóbbi arányos a zónák térfogati hányadával, és a Mg-atomok 80 %-kal jobban növelik a zónák járulékat, mint a Zn-atomok.

A szobahőmérsékleten nemesített ötvözetekben a diszlokációk a zónák átvágása révén mozognak. Az átvágási munka 155 mJ/m^2 .

Az ötvözet összetétele meghatározza szobahőmérsékleti metastabil állapotban a zónák térfogati hányadát és sugarát is. Ezekből viszont számítható a folyáshatár-növekedés, mert ez arányos $(\mathbf{fR})^{1/2}$ -nel. Az arányossági tényező $87,5 \cdot 10^5 \text{ MN/m}^{5/2}$.

A szobahőmérsékleten képződött zónák teljes reverziója és az összetétel-eltérés miatt az átmeneti η' fázis nem jöhet létre Lorimer—Nicholson-féle átnövési mechanizmussal. Ugyanakkor η' mennyisége és diszperzitása lényegesen nagyobb, ha a mintát előzőleg szobahőmérsékleten nemesítettük. η' magjai a zónabomlás után még egy ideig visszamaradó koncentráció-fluktuációkon alakulnak ki.

Az átmeneti fázis képződése legerőteljesebb 180°C környezetében, felső határa kb. 210°C , alacsonyabb hőmérsékleteken a képződése függ az ötvözet összetételétől. Egyes irodalmi adatokkal ellentétben ki tud alakulni a fázisdiagramnak mind az $(\alpha + \eta)$, mind az $(\alpha + T)$ tartományába eső ötvözeiteiben.

A szobahőmérsékleti előöregítés, valamint az ezt követő magasabb hőmérsékleten végrehajtott közbülső öregítés egyaránt előnyös hatást fejtenek ki η' képződésére. A kialakuló részecskék mennyiségét azonban $80\text{—}120^\circ\text{C}$ között a közbülső hőkezelés hőmérséklete alig befolyásolja, de a diszperzitás függ tőle.

Végbemegegy az átmeneti fázis képződése szobahőmérsékleten is, amennyiben magas hőmérsékleten egy alkalmas hőkezeléssel (pl. 160°C , 10 perc) már létrehoztunk elegendően diszperz eloszlású η' magokat. Ehhez azonban éves nagyságrendű időre van szükség, ami alatt viszont GP zónák legfeljebb kis mértékben képződnek. Ez η' nagyobb termodinamikai stabilitása miatt érthető.

DSC-vizsgálatok segítségével lehetőség nyílt elválasztani η' képződését a többi fázisétól, így meg tudtuk határozni különböző hőmérsékleteken a kinetikafüggvények menetét is. A képződési periódusban η' mennyisége $t^{2/3}$ -nal arányosan nő.

Az η' részecskék stabilitása a növekedés szakaszában a képződési idővel nő. Gyors felfűtés esetén bomlásuk elsőrendű kinetikával játszódik le.

Nagy diszperzitású η' kiválások jelenlétében a diszlokációk ugyancsak átvágós mechanizmussal mozognak nagyobb alakváltozások során.

A Si-szenyyező, amennyiben megfelelően oldatba vittük, az η' képződési tartományában egy gyors, erőteljes többletkeményedést okoz, mivel ilyenkor párhuzamosan AlMgSi típusú átmeneti fázis is képződik. A szobahőmérsékleti előnemesítés ebben az esetben káros. Ha az edzés az AlZnMg ötvözeteknél szokásos $470\text{—}480^\circ\text{C}$ -ról történik, a keménységnövelő hatás nem érvényesül. Ilyenkor viszont a szobahőmérsékleti hevertetés előnyös. A vasszenyyező alig befolyásolja η' képződését. A technikai tisztaságú anyagokban pedig a Fe leköti a Si zömét, így az utóbbi hatása csökken.

Az inkohereus kiválások közül csak az η és T fázisokkal foglalkoztunk. Ezek a vizsgálatok azonban kevésbé voltak részletesek, mert az η és T precipitátumoknak kisebb a gyakorlati jelentősége, mint a zónáknak és az átmeneti fázisnak.

DSC vizsgálatokkal szét lehetett választani a különböző fázisokhoz tartozó bomláshőt. Ezzel az egyes fázisok, sőt η három különböző, leggyakoribb orientációs helyzetének a kialakulását és átalakulását is tanulmányozni tudtuk. Valószínűsíteni lehetett, hogy a szétválaszthatóság az η -változatoknál a viszonylag nagy, erősen

különböző felületienergia-tag következménye. A vizsgálatok a T fázis esetében is többféle orientációs lehetőség kialakulására utaltak.

Nem sikerült egyértelműen eldönteni, hogy $\eta' \rightarrow \eta$ átalakulás létezik-e, az $\eta' \rightarrow \eta_2$ lehetősége azonban fennáll.

DSC és elektronmikroszkópi vizsgálatokkal meghatároztuk az egyes fázisok és fontosabb η -változatok képződési tartományát 3 alapötvetre, egy összetétel esetén pedig a képződési kinetikákat is megvizsgáltuk.

Az η és T fázis bomlása az η' -höz hasonlóan elsődrendű kinetikával játszódik le. Ennek a felismerésnek az alapján mód nyílt a nagy felfűtési sebességgel végzett DSC mérések segítségével a különböző típusú részecskék hatásának szétválasztására és az egyes hőkezelések alatt kialakult kiválásfajták mennyiségi tanulmányozására.

Befejezésül megemlítjük a vizsgálatoknak néhány olyan eredményét, amely a gyakorlat számára is fontos.

Szobahőmérsékleten hosszú idő alatt kialakult GP zónák mennyiségének, a zónák és a mátrix összetételének ismeretében lehetőség nyílt ötvözettervezésre az összes olyan jellemzőre, amelyeknek az összefüggését a koncentrációkkal ismerjük, pl. az ellenállásra és a folyáshatárra. A szennyezők hatását — ha kevésbé számszerűen is — de szintén becsülni lehet.

Hasonló tervezésre átmeneti, illetve stabil fázisoknál nincs mód, mert képződésük a gyakorlatilag előnyös esetekben már sokparaméteres folyamat. A képződési tartományok, a kinetikák, valamint az előkezelések és a szennyezők hatásának a fontosabb esetekre történt meghatározása alapján azonban a hőkezelések a korábbiaknál sokkal jobban kézbe tarthatók.

A gyors felfűtés közben lejátszódó bomlási, majd az ezt követő újraöregedési folyamatok megismerése a hegesztett szerkezetek hőbefolyásolt övezetének modellezését szolgáltatja.

Végül ezek az eredmények összehasonltási alapot szolgáltatnak napjaink egyik legtöbbet tanulmányozott kérdésének, a különböző adalékelemek hatásának a tisztázásához, amelyeknek az adagolásával elsősorban a törési és korróziós sajátságokat igyekeznek javítani.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetet mondok mindenkinek előtt az ALUTERV-FKI igazgatóságának, hogy lehetővé tette számomra a téma kidolgozását és mindvégig támogatta és figyelemmel kísérte munkámat.

Munkatársaim közül elsősorban Kovács Istvánné dr.-nak tartozom köszönettel, aki nemcsak a vizsgálatok egy részében vett részt, hanem a vele folytatott diszkussziók a jelenségek értelmezéséhez is döntően járultak hozzá. Az elektronmikroszkópi és elektrondiffrakciós vizsgálatokért Csanády Andrásné és dr. Turmezey Tibort illeti köszönet. A kapcsolódó technológiai kérdések zöméről dr. Buray Zoltán kollégámtól kaptam értékes felvilágosításokat.

Több mint fél évtizedes igen gyümölcsöző együttműködés folyt elsősorban a GP zónákkal kapcsolatos kérdések területén az ELTE Általános Fizika Tanszékével. Dr. Kovács István professzornak dr. Lendvai Jánosnak és dr. Ungár Tamásnak mondok köszönetet az elvégzett mérésekért és hatóság közös diszkusszióikért.

Az átmeneti és stabil fázisok DSC vizsgálatát és a számítógépes értékelést a MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumában dr. Várhegyi Gábornak és Lengyel Bélánénak kell megköszönnöm.

A KLTE Alkalmazott Fizika Tanszékén a Nordheim—Gorther-diagramok felvételéért Szentirmai Zsoltnek, a diffúziós vizsgálatokért dr. Kedves Ferencnek, dr. Beke Dezsőnek és dr. Gödény Imrének mondok köszönetet.

A Si szennyezőhatásának tisztázásában az NME Fémteni Tanszékén dr. Bárczy Pál volt szíves részt venni.

Végül köszönet illeti Sik Jenőné a gondos gépelési, Benkő Józsefné a rajzolási, Kohári Juditot a mintakezelési munkáért és az ALUTERV-FKI-nak mindazt a számos dolgozóját, akik a vizsgáto-
kat, illetve a dolgozat elkészítését közreműködésükkel lehetővé tették.

IRODALOM

1. Groma, G., Turmezey, T.: The effect of GP zones on the Deformation Structure in an AlZnMg Alloy. Proc. „Balaton” Conf. on El. Mi. Veszprém, 1975. M13.
2. Groma, G., Kovács-Csetényi, E.: Reversion and re-ageing in an AlZnMg alloy. Phil. Mag. 32, 869., (1975).
3. Gödény, I., Beke, D., Kedves, F. J., Groma, G.: Diffusion of ^{65}Zn in AlZn Solid Solution. Phys. Stat. Sol. (a) 32, 195, (1976).
4. Lendvai, J., Ungár, T., Kovács, I., Groma, G.: Correlation between resistivity increment and volume fraction of GP zones in an Al-3,2wt%Zn-2,2wt%Mg alloy. Phil. Mag. 33, 209, (1976).
5. Buray, Z., Buray-Mihályi, E., Groma, G., Lichtenberger-Bajza, E.: Änderungen der Spannungsrisskorrosionsfähigkeit und des Bruchverhaltens in den verschiedenen Wärmeeinflusszonen einer AlZnMg-Legierung mittlerer Festigkeit. Metall 30, 240, (1976).
6. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Kovács, I., Lendvai, J., Ungár, T.: A Guinier-Preston-zónák feldoldódásának vizsgálata AlZnMg ötvözetben 50—200 °C között. Bányászati és Kohászati Lapok (Kohászat) 109, 87., (1976).
7. Ungár, T., Kovács, I., Groma, G.: The investigation of zone formation and reversion in an AlZnMg alloy by X-ray small angle scattering. Proc. VIII. Hung. Diffraction Conf., Tihany, 1976. 106.
8. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Kovács, I., Lendvai, J., Ungár, T.: Investigations of the reversion phenomena in an Al-3,2%Zn-2,2%Mg alloy. Z. Metallkde. 67, 404., (1976).
9. Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I., Groma, G., Kovács-Csetényi, E.: Quantitative investigation of the reversion process of GP zones in an AlZnMg alloy. Z. Metallkde. 67, 683., (1976).
10. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Buray, Z., Gödény, I., Beke, D., Kedves, F. J.: Zinc diffusion in AlZn- and AlZnMg- alloys. Aluminium 52, 614., (1976).
11. Groma, G., Kovács-Csetényi, E.: Reverziós és újranemesedési folyamatok vizsgálata AlZnMg ötvözetben. Magyar Fiz. Folyóirat 24, 271., (1976).
12. Groma, G.: GP zónák reverziója. Technológiai és fizikai vizsgálatok az AlZnMg ötvözetrendszeren. Az Alumíniumipari Tervező és Kutató Intézet Közleményei 1976. Budapest. 27. old.
13. Groma, G.: Az átmeneti és stabil fázisok bomlása és átalakulása. Az Alumíniumipari Tervező és Kutató Intézet Közleményei 1976. Budapest. 67. old.
14. Csanády, Á., Bobok, Gy., Groma, G.: Fázisátalakulások in situ tanulmányozása elektronmikroszkóppal egy AlZnMg ötvözetben. IX. Kohászati Anyagvizsgáló Napok Kiadványa 1977. 153. l.
15. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Kovács, I., Lendvai, J., Ungár, T.: GP zónák képződésének és reverziójának komplex vizsgálata AlZnMg ötvözetben. IX. Kohászati Anyagvizsgáló Napok Kiadványa. 1977. 170. l.
16. Beke, D., Gödény, I., Kedves, F. J., Groma, G.: Diffusion of ^{65}Zn in dilute AlZn, AlMg, AlZnMg and AlZnFe alloys. Acta Met. 25, 539., (1977).
17. Kovács, I., Lendvai, J., Ungár, T., Turmezey, T., Groma, G.: The properties of an AlZnMg alloy deformation strengthened by Guinier—Preston zones. Acta Met. 25, 673., (1977).
18. Kovács-Csetényi, E., Groma, G., Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I.: Guinier—Preston-zónák reverziójának kvantitatív vizsgálata egy AlZnMg ötvözetben. Kohászati Lapok, 110, 229., (1977).
19. Csanády, Á., Bobok, Gy., Turmezey, T.: In-situ Observations of Phase Transformations in an AlZnMg Alloy by Electron Microscopy. Proc. of the XVth Czechoslovak Conf. on El. Mi. with Int. Participation, Prague 1977. II. 465.
20. Groma, G., Turmezey, T., Csanády, Á.: Study of Phase Transformations in AlZnMg Alloys. Proc. of the XVth Czechoslovak Conf. on El. Mi. with Int. Participation, Prague 1977. II. 509.
21. Kovács-Csetényi, E., Groma, G.: The Effect of Fe and Si on the Ageing Characteristics of AlZnMg Alloys. Wiss. Zeitschrift, Päd. Hochschule, Halle, 15, 25., (1977).
22. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I.: Complex Investigations of GP Zones in AlZnMg Alloys. Wiss. Zeitschrift, Päd. Hochschule, Halle, 15, 35., (1977).
23. Groma, G., Till, F.: Investigations of the Formation of Transition and Equilibrium Phases by DSC in AlZnMg Alloys. Wiss. Zeitschrift, Päd. Hochschule, Halle, 15, 36., (1977).

24. Groma, G., Lakner, J., Kovács, I.: Precipitation processes in AlZn 5Mg1 alloy and their effect on the macroscopic properties. Proc. Aluminium'78. Székesfehérvár, III/E/2-1. (1978. V. 9.)
25. Groma, G., Szentirmay, Zs.: The change of zone composition in AlZnMg alloys during ageing. Scripta Met. 12, 991., (1978).
26. Groma G., Szentirmay Zs.: A zónaképződés vizsgálata AlZnMg ötvözetekben elektromos transzport tulajdonságok mérése segítségével. Bányászati és Kohászati Lapok, (Kohászat), III, 471., (1978).
27. Tóth, L., Kovács-Csetényi, E., Groma, G., Ungár, T.: The effect of iron on phase transition in an AlZnMg alloy. Aluminium, 54, 632., (1978).
28. Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I., Groma, G., Kovács-Csetényi, E.: The decomposition of the solid solution state in the temperature range 20 to 200 °C in an AlZnMg alloy. J. Mat. Sci. 14, 671., (1979).
29. Várhegyi, G., Groma, G., Lengyel, M.: DSC examination of alloys. Thermochimica Acta, 30, 311., (1979).
30. Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Kovács, I., Ungár, T., Lendvai, J.: The composition of GP zones in AlZnMg alloys. ICAAA2, Visegrád, 1979. Collected Abstracts CSS4.
31. Szentirmay, Zs., Groma, G.: The influence of impurities on the R. T. ageing in Al-3,5Zn-2,5Mg alloys. ICAAA2, Visegrád, 1979., Collected Abstracts I 3.
32. Bárczy, P., Kovács-Csetényi, E., Groma, G.: The effect of Si in an AlZnMg alloy. ICAAA2 Visegrád, 1979., Collected Abstracts I 4.
33. Kovács, I., Lendvai, J., Ungár, T., Kovács-Csetényi, E., Groma, G.: The effect of two step aging on the mechanical properties of AlZnMg alloys. ICAAA2, Visegrád, 1979, Collected Abstracts PD2.
34. Kovács-Csetényi, E., Groma, G.: Zone formation above room temperature in an AlZnMg alloy. ICAAA2, Visegrád, 1979, Collected Abstracts CSS8.
35. Groma, G., Kovács, I., Kovács-Csetényi, E., Lendvai, J., Ungár, T.: The composition of Guinier—Preston-zones in AlZnMg alloys. Phil. Mag. A. 40, 653., (1979).

Adler, P. N. és DeIasi, R., 1977, Met. Trans. A. 8A, 1185.

Adler, P., Geschwind, G., DeIasi, R., 1972, Thermal Analysis (Szerk.: Wiedemann, Birkhausen Verlag, Basel, 2. kötet. 747. o.).

Asano, K. és Hirano, K., 1968/a., Trans. J. I. M. 9, 24.

Asano, K. és Hirano, K., 1968/b., Trans. J. I. M. 9, 149.

Asano, K., Abe, M., Fujiwara, A., 1976, Mat. Sci. and Eng. 22, 61.

Asano, K., Abe, M., Fujiwara, A., 1977, Kobe Steel Res. Rev. 27, 61.

Auger, P., Bernole, M., Blaschko, O., Ernst, G., Quittner, G., Just, W., Roth, M., 1978, Scripta Met. 12, 583.

Auld, J. H. és Cousland, S. Mck., 1971. Scripta Met. 5, 765.

Auld, J. H. és Cousland, S. Mck., 1974, J. Australian Inst. Met. 19, 194.

Auld, J. H. és Cousland, S. Mck., 1976, Metal Sci., 10, 445.

Avrami, M., 1939, J. Chem. Phys. 7, 1103.

Avrami, M., 1940, J. Chem. Phys. 8, 212.

Avrami, M., 1941, J. Chem. Phys. 9, 177.

Bánizs K., 1978, Kandidátusi értekezés.

Bárczy P., 1978, Aluminium Konferencia'78 Kiadvány (Székesfehérvár), II. kötet, III. P/12.

Bardhan, P. és Starke, E. A., 1968, J. Mat. Sci. 3, 577.

Baur, R., és Gerold, V., 1962, Acta Met. 10, 637.

Beke, D., Gödény, I., Kedves, F. J., Groma, G., 1977, Acta Met. 25, 539.

Bergman, G., Wangh, J. L. T., Pauling, L., 1952, Nature 169, 1057.

Bergman, G., Wangh, J. L. T., Pauling, L., 1957, Acta Cryst. 10, 254.

Brofman, P. J., Judd, G., 1978, Met. Trans. A. 9, 457.

Brown, L. M. és Ham, R. K., 1971, Strengthening Methods in Crystals (szerk.: A. Kelly — R. B. Nicholson, Elsevier, N. Y.)

Bryant, A. J., 1966, J. Inst. Met. 94, 94.

Buray, Z., Buray-Mihályi, E., Groma, G., Lichtenberger, E., 1976, Metall, 30, 240.

Butchers, E. és Hume-Rothary, W., 1945, J. Inst. Met. 71, 291.

Butchers, E., Raynor, G. W., Hume-Rothary, W., 1943, J. Inst. Met. 69, 209.

Butler, E. P. és Swann, P. R., 1976, Acta Met. 24, 343.

- Ceresara, S. és Fiorini, P., 1972, *Mat. Sci. Eng.* 10, 205.
 Chang, S. és Morral, J. E., 1975, *Acta Met.* 23, 685.
 Chou, A. C., 1978, *Scripta Met.* 12, 421.
 Christian, J. W., 1975, *Transformations in Metals and Alloys*, (second edition, Pergamon Press, Oxford)
 Cornish, A. J. és Day, M. K. B., 1969, *J. Inst. Met.* 97, 44.
 DeArdo, J. jr. és Simensen, Chr. J., 1973, *Met. Trans.* 4, 2413.
 Dehlinger, U. és Knapp, H., 1952, *Z. Metallk.* 43, 223.
 DeIasi, R. és Adler, P. N., 1977, *Met. Trans. A* 8A, 1177.
 Dix, E. H., 1950, *Trans. ASM.* 42, 1057.
 Dünkeloh, K. H., Gerold, V., Kralik, G., 1973, *Proc. 3rd Int. Conf. on the Strength of Metals and Alloys*, Cambridge, 1. kötet).
 Dünkeloh, K. H., Kralik, G., Gerold, V., 1974, *Z. Metallk.* 65, 291, 773.
 Edwards, J. T. és Hillel, A. J., 1977, *Phil. Mag.* 35, 1221.
 Elagin, V. I., Zakharov, V. V., Petrova, A. A., 1975, *Metals Sci. and Heat Treatment* 17, 866.
 Embury, J. D. és Nicholson, R. B., 1965, *Acta Met.* 13, 403.
 Fickett, F. R., 1971, *Cryogenics* 11, 349.
 Fine, M. E., 1959, *Acta Met.* 7, 228.
 Fine, M. E., 1975, *Met. Trans.* 6A, 625.
 Fink, W. L., Willey, L. A., 1924, *Trans. AIME* 124, 78.
 Gayler, G., 1922, *J. Inst. Met.* 22, 213.
 Geisler, A. H., 1951, *Phase Transformation in Alloys* (kiadó: J. Wiley)
 Gerold, V., 1966, *Proc. Conf. Small Angle X-Ray Scattering* (szerk.: H. Brumberger) Gordon and Breach.
 Gerold, V., 1971, *Z. Metallk.* 62, 796.
 Gerold, V., 1977, *J. Appl. Cryst.* 10, 25.
 Gerold, V. és Haberkorn, V., 1959, *Z. Metallk.* 50, 568.
 Gerold, V. és Schweizer, W., 1961, *Z. Metallk.* 52, 76.
 Gerold, V., Epperson, J. E., Kistorz, G., 1977, *J. Appl. Cryst.* 10, 28.
 Gerold, V., Merz, W., Kawano, O., 1970, *Z. Metallk.* 61, 102.
 Gislser, A. H., 1951, *Phase Transformations in Solids* (kiadó: J. Wiley, N. Y.)
 Gjønnes, J. és Simensen, C. J., 1970, *Acta Met.* 18, 881.
 Gorthner, C. J., 1935, *Physica* 2, 383.
 Gödény, I., Beke, D., Kedves, F. J., Groma, G., 1975, *Phys. Stat. Sol.* 32A, 195.
 Graf, M. R., 1956/a., *Comptes Rendus* 242, 1311.
 Graf, M. R., 1956/b., *Comptes Rendus* 243, 2834.
 Graf, M. R., 1957, *Comptes Rendus* 244, 337.
 Groma G., 1976/a., *ALUTERV-FKI Közl.* 61. o.
 Groma G., 1976/b., *ALUTERV-FKI Közl.* 73. o.
 Groma G., 1976/c., *ALUTERV-FKI Közl.* 179. o.
 Groma G. és Kovács-Csetényi E., 1979, VII. Ritkafém Konf. Kiadványa, 275. o.
 Groma G. és Szentirmay Zs., 1978, *Kohászati Lapok — Kohászat*, 111, 471.
 Groma, G., Kovács-Csetényi, E., Buray, Z., Gödény, I., Beke, D., Kedves, F. J., 1976, *Alumínium* 52, 614.
 Grove, C. A. és Judd, G., 1973, *Met. Trans.* 4, 1023.
 Guinier, A. és Fournet, G., 1955, *Small Angle Scattering of X-rays* (kiadó: J. Wiley and Sons, N. Y.)
 Gupta, B. B. és Mallik, A. K., 1975, *Trans. J. I. M.* 16, 779.
 Hasiguti, R. R., 1967, *Lattice Defects and their Interactions* (kiadó: Gordon and Breach, N. Y.)
 Herenguel, J. és Chaudron, G., 1941, *Métaux et Corrosion* 16, 33, 49.
 Hillel, A. J., 1970, *Acta Met.* 18, 253.
 Hillel, A. J. és Edwards, J. T., 1977, *Phil. Mag.* 35, 1231.
 Hillel, A. J., Edwards, J. T., Wilkes, P., 1975, *Phil. Mag.* 32, 189.
 Hirano, K., 1974, *Thermal Analysis: Comparative Studies on Materials* (szerk.: H. Kambe and P. D. Garn, kiadó: J. Wiley and Sons, N. Y.)
 Hirano, K. és Asano, K., 1970, *Trans. J. I. M.* 11, 225.
 Hirano, K. és Takagi, Y., 1955, *J. Phys. Soc. Jap.* 10, 187.
 Hornbogen, E., 1978, *Met. Trans. A* 9, 134.
 Huebner, R. P., 1968, *Phys. Rev.* 171, 63.
 Jacobs, M. H. és Pashley, D. W., 1969, *Inst. of Met. Monograph and Rep. Ser. No. 33.* (London)
 Juhász A., Tasnády P., Kovács I., Ungár T., 1981, *J. Mat. Sci.* 16, 367.

- Jürgens, G., Kempe, M., Löffler, H., 1974/a., Phys. Stat. Sol. (a) 21, K39.
 Jürgens, G., Kempe, M., Löffler, H., 1974/b., Phys. Stat. Sol. (a) 21, K73.
 Jürgens, G. és Kempe, M., 1976, Neue Hütte 21, 166.
 Kawano, O., Murakami, Y., Nakazawa, T., Liu, K. S., 1970, Trans. J. I. M. 11, 12.
 Kedves, F. J., Gergely, L., Hordós, M., Kovács-Csetényi, E., 1972, Phys. Stat. Sol. (a) 13, 685.
 Kelly, A. és Nicholson, R. B., 1963, Progr. Mat. Sci. 10, 151.
 Kent, K. G., 1970, Austr. Inst. Met. J. 15, 171.
 Kikuchi, M., Horii, K., Mizuno, M., 1977, J. Jap. Inst. Light. Met. 27, 417.
 Kovács I., 1979, személyes közlés.
 Kovács, I. és Zsoldos, L., 1973, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó.
 Kovács, J., Lendvai, J., Nagy, E., 1972, Acta Met. 20, 975.
 Kovács-Csetényi E., 1976, Bányászati és Kohászati Lapok 109, 371.
 Köster, W. és Dullenkopf, W., 1936, Z. Metallk. 28, 309, 363.
 Köster, W. és Kam, K., 1938, Z. Metallk. 30, 320.
 Köster, W., és Wolf, W., 1936, Z. Metallk. 28, 155.
 Lacom, W., Degischer, H. P., Zahra, A., 1979, Coll. Abstr. ICAAA2, Visegrád, CSS7.
 Laves, F., és Löschberg K., 1934, Nachr. Acad. Wiss. (Göttingen) 1, 59.
 Laves, F., Löschberg, K., Witte, H., 1935, Metallwirtschaft 14, 793.
 Lendvai J., 1978, Magyar Fizikai Folyóirat 26, 245.
 Lendvai, J., Honyek, Gy., Kovács, I., 1979, Coll. Abstr. ICAAA2, Visegrád, CSS5.
 Lendvai, J., Ungár, T., Kovács, I., 1977, Phil. Mag. 35, 1119.
 Lifshitz, I. M. és Slyozov, V. V., 1961, Phys. Chim. Solids 19, 35.
 Little, A. T., Raynor, G., Hume-Rothery, W., 1943, J. Inst. Met. 69, 423, 467.
 Lorimer, G. W., 1972, Alumino 41, 35.
 Lorimer, G. W. és Nicholson, R. B., 1966, Acta Met. 14, 1009.
 Lorimer, G. W. és Nicholson, R. B., 1969, Inst. Met. Monograph and Rep. Ser. No. 33. (London).
 Lyman, C. E. és Vander-Sande, J. B., 1976, Met. Trans. A. 7, 1211.
 Marth, P. E., Aaronson, H. I., Lorimer, G. W., Bartel, T. L., Russell, K. C., 1976, Met. Trans. A. 9, 137.
 Melander, A. és Persson, P. A., 1978, Acta Met. 26, 267.
 Mondolfo, L. F., 1969, J. Inst. Met. 97, 95.
 Mondolfo, L. F., 1971, Metallurgical Reviews 153, 95.
 Mondolfo, L. F., Gjostein, N. A., Lewinson, D. N., 1956, Trans AIME 206, 1378.
 Morinaga, M., Murakami, M., Kawano, O., Murakami, Y., 1971, Phil. Mag. 24, 527.
 Mott, N. F., 1937, J. Inst. Met. 60, 267.
 Murakami, M., Kawano, O., Murakami, Y., 1969, Acta Met. 17, 29.
 Naess, S. E., 1969, Scripta Met. 3, 179.
 Nicholson, R. B., Thomas, G., Nutting, J., 1958/59, J. Inst. Met. 87, 429.
 Nishimura, H. és Murakami, Y., 1950, Mem. Fac. Eng. Kyoto Univ. 12, 47.
 Nishimura, H. és Murakami, Y., 1953, Mem. Fac. Eng. Kyoto Univ. 15, 9.
 Ohta, M. és Hashimoto, F., 1964, J. Phys. Soc. Jap. 19, 130, 133.
 Osamura, K., Hiraoka, Y., Murakami, Y., 1973, Phil. Mag. 28, 809.
 Panseri, C. és Federighi, T., 1960, Acta Met. 8, 217.
 Panseri, C. és Federighi, T., 1963, Acta Met. 11, 575.
 Pashley, D. W., Jacobs, M. H., Vietz, J. T., 1967, Phil. Mag. 16, 51.
 Polmear, I. J., 1957/58, J. Inst. Met. 86, 113.
 Polmear, I. J., 1958/59, J. Inst. Met. 87, 24.
 Prasad, B. és Mallik, A. K., 1973, Metallography 6, 527.
 Radomsky, M., Gerlach, R., Kabish, O., Korngiebel, E., Löffler, H., 1979, Coll. Abstr. ICAAA2, Visegrád, CSS9.
 Reed, R. P., 1972, Cryogenics 12, 259.
 Renouard, M., 1951, Rev. Mét. 48, 944.
 Rieder, K., 1936, Z. Metallk. 28, 312.
 Romanova, R. R., Rakin, V. G., Bujnov, N. N., Jelagin, V. J., 1967, Fiz. Metallov i Metallovedenie 23, 643.
 Rundman, K. B. és Hilliard, J. E., 1967, Acta Met. 15, 1025.
 Rybka, T. és Bourassa, R. R., 1973, Phys. Rev. B8, 449.
 Ryum, N., 1968, Acta Met. 16, 327.
 Ryum, N., 1969, Acta Met. 17, 821.
 Ryum, N., 1975, Z. Metallk. 66, 338, 344.

- Ryum, N. és Baardshet, K., 1968, J. Inst. Met. 96, 92.
Ryum, N., Haegland, B., Lindtveit, T., 1967, Z. Metallk. 58, 28.
Sander, W. és Meissner, K. L., 1923, Z. Metallk. 15, 170.
Sander, W. és Meissner, K. L., 1926, Z. Metallk. 16, 12.
Saulnier, A., 1948, Compt. Rend. 226, 181.
Saulnier, A. és Cabane, G., 1949, Rev. Mét. 46, 13.
Schmalzried, H. és Gerold, V., 1958, Z. Metallk. 48, 291.
Siebel, G., 1943, Z. Electrochem. 49, 218.
Smith, W. F. és Grant, N. J., 1969, Trans. ASM. 62, 724.
Smith, W. F. és Grant, N. J., 1970, Met. Trans. 1, 979.
Soeno, K. és Chigasaki, M., 1973, J. Inst. Met. 37, 658.
Sperry, P. R., 1970, Met. Trans. 1, 2650.
Strawbridge, D. J. és Hume-Rothery, W., 1948, J. Inst. Met. 74, 191.
Subbarao, K. V., 1971, Thesis, Manchester Univ.
Suzuki, H., Kanno, M., Asami, S., Horiya, T., 1972, J. Jap. Inst. Light. Met. 22, 62.
Suzuki, H., Asami, S., Kanno, M., 1972, J. Jap. Inst. Light. Met. 22, 135.
Suzuki, H., Kanno, M., Asami, S., 1972, J. Jap. Inst. Light. Met. 22, 269.
Suzuki, H., Kanno, M., Fukunaga, K., 1972, J. Jap. Inst. Light. Met. 22, 286.
Suzuki, H., Asami, S., Kanno, M., 1973, J. Jap. Inst. Light. Met. 23, 126.
Szentirmay, Zs., és Groma G., 1979, Coll. Abstracts ICAAA2, Visegrád, I 3.
Takamura, J., Koike, M., Furukawa, K., 1978, J. Nucl. Mater. 69—70, 738.
Tarschisch, L., Titov, F., Garjanov, F. K., 1934, Phys. Z. U. S. S. R. 5, 503.
Taylor, G. L., 1963-64, J. Inst. Met. 92, 301.
Thackery, P. A., 1968, J. Inst. Met. 96, 228.
Thackery, P. és Thomas, A. T., 1971, J. Inst. Met. 99, 114.
Thomas, G. és Nutting, J., 1959-60, J. Inst. Met. 88, 81.
Thomson, D. S., 1969, Proc. 2nd. Inst. Conf. Thermal Anal. Worchester, Academic Press, N. Y. 1147. o.
Tomita, Y., Liu, K. S., Murakami, Y., Morinaga, M., 1974, Trans. JIM. 15, 99.
Ungár, T., 1979/a., Coll. Abstr. ICAAA2, Visegrád, CSS6
Ungár, T., 1979/b., Z. Metallk. 70, 739.
Ungár, T., 1979/c., Kandidátusi értekezés
Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I., Groma, G., Kovács-Csetényi, E., 1976, Z. Metallk. 67, 683.
Ungár, T., Lendvai, J., Kovács, I., 1979, Aluminium, 55, 663.
Várhegyi, G., 1978, Thermochemica Acta 25, 201.
Várhegyi, G., Groma, G., Lengyel, M., 1979, Thermochemica Acta 30, 311.
Vassel, K. R. és Kovács-Csetényi, E., 1971, Proc. Res. Inst. Non-Ferrous Met. Budapest, 9, 323.
Wagner, C., 1961, Z. Electrochemie 65, 581.
Whelan, M. J., 1969, Metal Sci. J. 3, 95.
Wilkes, P., 1968, Acta Met. 16, 863.
Williams, T., 1962-63, J. Inst. Met. 91, 324.
Zahra, A., Zahra, C. Y., Lafitte, M., Lacom, W., Degisher, H. P., 1979, Z. Metallk. 70, 172.

KÖNYVISMERTETÉS

F. Beleznyay, G. Ferenczi, J. Giber (eds): *New Developments in Semiconductor Physics, Lecture Notes in Physics 122*, Springer-Verlag, 1979

1979 júliusában Nemzetközi Nyári Iskolát rendeztek a szegedi egyetemen, *New Developments in Semiconductor Physics* címmel. A kötet ezen az iskolán elhangzott előadásokat tartalmazza, szám szerint tizenhatot. Az előadások igen tág területet ölelnek fel, s közöttük több olyan van, amelyben új félvezető anyagokra vonatkozó, új kísérleti módszerekkel nyert eredményeket és érdekes elméleti megfontolásokat ismertetnek.

B. C. Cavenett írása az elektron-lyuk rekombinációs folyamatok tanulmányozásának egy nagy érzékenységu módszerével, az optikai úton detektált mágneses rezonanciával foglalkozik. H. G. Grimmeis „Optikai gerjesztésu mély nivó spektroszkópia félvezetőkben” című előadásában elsősorban az izolált ponthibák által létrehozott mély elektronnivók vizsgálatára helyezi a hangsúlyt. A. Mircea, D. Pons és S. Makram-Ebeid írása a „Depleted Layer Spectroscopy”-t ismerteti. A DLS a p-n átmenetekenél, félvezető–fém barriereknél, vagy fém–félvezető–szigetelő struktúrákban létrejövő kiürített rétegek speciális tulajdonságait használja ki és segítségével a tiltott sávban levő lokalizált elektronállapotok detektálhatók, megszámlálhatók és jellemezhetők.

Mindhárom fenti cikk arra törekszik, hogy átfogó képet adjon a tárgyalt módszerről; áttekinti az elméleti alapokat, az alternatív kísérleti megoldásokat és a módszerrel nyert legfrissebb kísérleti eredményeket.

J. T. Devreese „Elektron-fonon kölcsönhatás: polaron-transzport” című kitűnő írásában kritikailag áttekinti a Fröhlich-polaron effektív tömegének, sajátenergiájának, optikai abszorpciójának, mozgékonyágának számítására használatos, szinte valamennyi módszert és analitikus eredményeket a Boltzmann-egyenletre a nem-ohmikus tartományban.

Ferenczi G. egy nem-sugárzásos rekombinációs centrum tértöltés-spektroszkópia segítségével történt azonosításáról számol be $\text{GaAs}_{0.52}\text{P}_{0.48}$ -ban. Giber J. a Si/SiO_2 rendszer határfelületi lokalizált elektronállapotairól ír, új és a kísérletekkel jobban összeegyeztethető osztályozást javasolva a lokalizált állapotokra. Cikke áttekinti mind a kísérleti eredményeket, mind a kvantummechanikai számítási módszereket. Kósa-Somogyi I., Koós M. és V. A. Vasziljev cikke az amorf félvezetők fotolumineszcenciájával foglalkozik.

A kötetben szereplő többi előadás közül még J. M. Langerét említem külön, ennek témája: nagy rács-relaxációjú jelenségek. (R. S.)

K. A. Müller and H. Thomas (eds): *Structural Phase Transitions I. Topics in Current Physics 23, I-X, 1-190 pp.* Springer Verl. Berlin, Heidelberg, New York, 1981.

A „Topics in Current Physics” sorozat 23. kötete, amely polimorfok strukturális átalakulásával foglalkozik, három témakörből tervezett összefoglaló munka első része. Polimorfok szerkezetváltozása az utóbbi években jelentékenyen fejlődött kísérletileg és elméletileg egyaránt. A kötet tanulmányai azokkal az átalakulásokkal foglalkoznak, melyek során a kristályt alkotó egyes atomok, vagy molekula-egységek kis elmozdulásokkal új pozíciókba kerülnek, vagy az atomok, illetőleg kristallográfiai motívumokat alkotó több atomból álló egységeknek új rendje ekvivalens pozíciók elfoglalásával alkul ki. Ez utóbbi folyamatok jelentős szerepet játszanak az iparilag fontos piezoelektromos, ferroelektromos, pyroelektromos kristályok fázisátalakulásában.

A fázisátalakulások tanulmányozásában lényeges szerepet betöltő mennyiség a rendparaméter, amely a térfogategységre eső rendezett helyzetben levő atomok, molekulák számát jelöli. Ennek meg-

felelően a kötetben közölt tanulmányok részletesen elemzik ennek a paraméternek szerepét és egyes fizikai mennyiségektől, főleg a hőmérséklettől való függését.

A tárgyalásmód részletes rácsdinamikai ismereteket feltételez.

A három részre tervezett munka első kötete egy bevezető értekezés után kísérleti vizsgálatokat és eredményeket összefoglaló három tanulmányt tartalmaz. Az elsőben P. A. Fleury és K. Lyons tárgyalja a fázisátalakulások optikai kísérleteit és az optikai módszerekkel kapott eredmények értékelését. A szerzők a kísérletek két csoportját ismertetik. Az első csoportba sztatikai mérések (törésmutató, kettős törés) tartoznak, míg a második csoport mérései (fényszóródásmérés, infravörös, optikai abszorpció és fluoreszcencia) dinamikai információkat nyújtanak.

A laser megjelenése az optikai és ezen belül a fázisátalakulásra vonatkozó vizsgálatok nagymértvű fejlődésével és kiterjedésével járt. Fleury és Lyons munkája szimmetriacentrikus: az optikai módszereket célszerű aszerint csoportosítani, hogy a kristályoknak van-e szimmetria centruma vagy nincs. Magasabb rangú tenzorokkal leírható folyamatok ily módon nem kategorizálhatók, ezeket a tanulmány a nem lineáris optikai kísérletek keretében külön tárgyalja.

A továbbiakban a kísérleti technikák áttekintése következik az alábbi sorrendben: infravörös abszorpció és reflexió, optikai abszorpció és fluoreszcencia, kettős törés, fényszóródás. Az ismertetett kísérleti módszerek alkalmazását mutatják be a következő fejezetek: ferroelasztikus átalakulások ($P\text{ PrAlO}_3$), nem piezoelektromos átalakulások (KDP és izomorjai), csatolt módusok (proton-fonon csatolás) vizsgálata Raman spektrofotometriával (CsH_2AsO_4 és KH_2AsO_4), fluoroperovszkit rendszerek antiferrodisztorív átalakulása, SrTiO_3 -tal elért legújabb eredmények. Külön fejezet foglalkozik a molibdátokkal, melyek ferroelektromossága a MoO_4 csoportok rotációjára visszavezethető igénybevétel és piezoelektromos csatolások következménye. A továbbiakban a TaSe_2 , K_2SeO_4 , BaMnF_4 tárgyalása után a tanulmányt a nem lineáris optikai értelmezés és multikritikus jelenségek tömör összefoglalása fejezi be. A tanulmányt 698 címet tartalmazó bibliográfia teszi különösen értékessé, mely 1971-től kezdve gyűjti össze a szakirodalmat.

A kötet következő tanulmányát B. Dorner írta a rugalmatlan neutronszerkezet vizsgálata (Investigation of Structural Phase Transformations by Inelastic Neutron Scattering). A rugalmatlan neutronszerkezet vizsgálata a rácsdinamika jól ismert kísérleti módszere, melyet polimorfok fázisátalakulásának tanulmányozására viszonylag kevésbé alkalmazták, ezt bizonyítja az előző tanulmány nál jóval kevesebb címet tartalmazó bibliográfia is. Ezért Dorner munkáját különösen hézagpótlónak kell tekinteni. A tanulmány felépítése a következő: kisméretű atomi elmozdulásokkal járó szerkezetváltozások, csökkenő frekvenciájú lágy módusok, molekuláris kristályok dinamikája. A tanulmány befejező szakasza az előzmények alapján külön tárgyalja a szigetelőket és vezetőket.

B. Lüthi és W. Rehwald tanulmánya (Ultrasonic Studies Near Structural Phase Transitions) kristályok rugalmas tulajdonságaival foglalkozik a fázisátalakulás közelében. Ultrahang kísérletek a rugalmas állandó méréseivel értékes információkat szolgáltatnak az átalakulási göcök lokalizációjáról, a fázisdiagramokról, valamint a fázisátalakulás rendjének meghatározásáról. A rugalmasság hőmérsékletfüggésének vizsgálata adatokat szolgáltat az igénybevétel és rendparaméter csatolásának meghatározására. Ezenfelül a rugalmasság akusztikai mérése lehetővé teszi a korszerű renormalizációs elméletek (cross-over, dimenzionális hatások) kísérleti ellenőrzését. A mérési módszerek és elméleti értékelésük, valamint a szimmetriaviszonyok tárgyalása után nagyon értékesek azok a táblázatok, amelyek 63 anyag átalakulására vonatkozó adatokat (ferroelektromos átmenetek; igénybevétel és rendparaméter; fonon átmenetek; anyagok, melyekre nézve az igénybevétel nem rendparaméter, például szilárd elektrolitok stb.) tartalmaznak.

Az akusztikus kísérletek eredményei a következők:

1. Valamennyi, az igénybevétellel csatolt folyamat rugalmassági függvénnel írható le;
2. Formálisan azonos csatolás esetén még eltérő átalakulási mechanizmusok is hasonló rugalmassági függvényekhez vezetnek;
3. Bilineáris csatolás esetén az anyag rugalmassága a fázisátalakulási tartomány közelében instabilissá válik;
4. Az ultrahang gyengítési tényező a rendparaméter dinamikus változásáról szolgáltat információt.

Ezt a munkát 222 bibliográfiai idézet egészíti ki.

A kötet igen jól használható információk és adatok közlése mellett polimorfok szerkezetváltozásának magas szintű összefoglalása. Mindazok számára, akik polimorfok kristályszerkezetének átalakulásával foglalkoznak, a könyv rendkívül hasznos tekintettel arra, hogy a legújabb eredményeket dolgozza fel. Tömörsege miatt csak olyan olvasóknak ajánlható, akik a témakör alapjait már jól ismerik és a tématerületen dolgoznak.

Dr. Morlin Zoltán

The Computer in Optical Research

A Topics in Applied Physics sorozat 41. köteteként jelentette meg a Springer Verlag 1980-ban ezt a művét. A könyv az optika és a kvantumelektronika néhány olyan területét öleli fel, amely számítógépek alkalmazása nélkül ma már szinte nem művelhető.

A számítógépek megjelenése és elterjedése fontos változásokat hozott az optikai kutatások területén is. Az optika néhány klasszikus területe, mint az optikai leképezés, lencsék és optikai rendszerek tervezése és minősítése, vékonyréteg-optika, a számítástechnikai eszköztárral megerősödve újból perspektivikus területté vált, ugyanakkor a számítógép új területeket is nyitott az optikán belül, mint pl. a számítógéppel generált hologram-technika (CGH).

A könyv az optika e leginkább számítógépigényes területeivel ismerteti meg az optika területén dolgozókat. Az optika elveit ismertnek tételezve fel, elsősorban az optikában használt numerikus módszerek alapelveire helyezi a súlyt, anélkül azonban, hogy a programozás technikáját érintené.

Az első fejezet a lencsék és lencserendszerek tervezésénél, az optikai átviteli függvény meghatározásánál alapvető szerepet játszó diffrakciós integrálok kiszámításának módszereivel foglalkozik. Az itt fellépő legnagyobb nehézség az, hogy az integrandus egy gyorsan oszcilláló függvény, ugyanakkor az integrálás ezen oszcilláló függvény igen nagy tartományára történik. A különböző numerikus integrálási módszerek alapjainak ismertetése mellett részletes elemzést kapunk azok hatékonyságáról, pontosságáról, a konvergencia gyorsaságáról.

A könyv leghosszabb (120 old.) és legalaposabban tárgyalt fejezete a valószínűség-számítás és statisztika számítástechnikai módszereit tárgyalja. Tömör, de alapos és didaktikus bevezetőt nyújt a valószínűségelméletről, megismerteti az optikában használatos konvolúciós és transzformációs elméletekkel, a Monte-Carlo módszerrel. Néhány tipikus példán keresztül ismerteti e módszerek alkalmazását az optikai rendszerek tervezésében, az atmoszférikus turbulencia leírásában, valamint a lézer „specple” tulajdonságainak vizsgálatánál.

A harmadik fejezet az optikában használatos optimalizációs módszerekkel foglalkozik. Az optimalizációs módszerek ismertetése négy alapvető felhasználás igényeinek megfelelően történik: görbe fittelés (elsősorban a spektroszkópiai mérések során felvett csúcsok főbb paramétereinek meghatározására szolgáló módszerek), lencsetervezés (geometriai modell és diffrakciós elmélet alapján), vékonyréteg struktúrák tervezése, valamint adott megvilágítási eloszlást létrehozó optikai rendszerek tervezése.

A következő fejezet az asztrológiai optika számítástechnikát igénylő területeiről nyújt egy bevezetésnek tekinthető olvasmányos áttekintést, míg az utolsó fejezet a számítógéppel előállított hologram technikáról ad összefoglaló leírást. Ismerteti a hologram-síkban a tárgy hullámfrontjának meghatározására szolgáló módszereket, e hullámfrontból előállított transzmissziós hologram dekódolási eljárását, valamint a számítógépes hologram-rekonstrukciót. Bemutatja az adott hologram-készítési és rekonstrukciós eljárások számítógépes szimulációját, a térszűrés elvét, a diffúzorok szerepét.

A könyv az optika területén aktívan dolgozók számára ajánlható.

Kiss Árpád

Inverse Scattering Problems in Optics

Az optika egy — az utóbbi években igen gyorsan fejlődő —, érdekes ágáról szól az 1980-ban a Springer Verlagnál megjelent könyv. Az optikában az inverz szórási probléma — bár régóta ismert — mégis csak az elmúlt időszakban vált elfogadott és eredményes módszerrel.

Ha egy fényforrásban ismerjük a lejátszódó fizikai folyamatokat, akkor e folyamatok ismeretében meghatározható a fényforrás által kibocsátott fény tulajdonsága (spektrális tulajdonság, koherencia stb.) Az inverz forrás problémájának alatt értjük, hogy a kibocsátott fény tulajdonságainak vizsgálatából visszakövetkeztethetünk a fényforrásban lejátszódó fizikai folyamatokra is. Hasonlóképpen, direkt szórási probléma alatt értjük, hogy a szórócentrumok fizikai tulajdonságainak és kölcsönhatásainak ismeretében meghatározható a szórt sugárzás tulajdonsága. Az inverz szórási probléma alatt azt értjük, hogy egy sugárzási detektor jeléből — a szórt sugárzás mérése esetén — meg tudjuk határozni a szórócentrumok tulajdonságait. E problémakör néhány vetületével ismert meg e könyv.

A bevezetést követő első fejezet megismerteti a klasszikus fényszórás elméletével mind a determinisztikus (pl. perturbált törésmutatójú folytonos anyag), mind statisztikus (pl. szabad részecskék) szóróközeg esetén, majd egydimenziós modellt tételezve fel, az inverz probléma megoldását és annak korlátait írja le.

A könyv második és harmadik fejezete az utóbbi években rohamosan fejlődő foton-statisztikai módszerrel foglalkozik. Statisztikus szóróközeg esetén a szórt sugárzás koherencia-tulajdonsága (első- és magasabb rendű korrelációs függvényei) hordozza az információt a szóróközeg statisztikus tulajdonságairól. Amennyiben a szórási hatáskeresztmetszet kicsi, akkor a szórt intenzitás detektálására a fotonszámolás jöhet csak szóba. Ez a problémát tovább bonyolítja a statisztikus foton-detektálási folyamat közbeiktatásával. Az inverz probléma így kettős: először a mért fotoelektronok statisztikus tulajdonságaiból kell visszaállítani a szórt fény valószínűségi jellemzőit (koherencia függvényeit), majd ebből következtethetünk a szóróközeg tulajdonságaira. Részletesen elemzi magát a foton-detektálási folyamatot, a fotoelektron-sokszorozók tökéletlenségeiből adódó mérési hibákat és hatásukat az inverz probléma megoldására. Az is világossá válik az olvasó számára, hogy itt — a foton-korrelációs technikában — még az inverz probléma megoldásának elején járunk: a fotoelektron-statisztikából is csak erős megkötések esetén következtethetünk a szórt fény statisztikus tulajdonságaira.

A következő fejezet igen nagy matematikai apparátust felvonultatva az inverz probléma megoldásának stabilitását, a megoldások egyértelműségét vizsgálja. Foglalkozik az a priori ismeretek szerepével is.

Az utolsó két fejezetben két — az előbbiektől eltérő — speciális problémakörrel olvashatunk. Érdekes összefoglalót olvashatunk arról, hogy sok irányban egyidejű lézeres abszorpciómérésből hogyan következtethetünk lángok részecske-koncentrációjára, azok térbeli eloszlására, illetőleg időbeli változására. Az utolsó probléma: hogyan lehet a visszaszórt radarjel polarizációs tulajdonságait felhasználni és ezzel a képminőséget — a felbontást — javítani. Ez az alkalmazási példa nem véletlenül került e kitűnő könyvbe: a visszavert radarjelek felismerhetőségi kritériumai igen erős stimuláló hatást fejtettek ki eddig is az inverz szórási problematika fejlődésére, és e problémakör tanulmányozása további fontos és elvi kérdésekre keres még választ.

Igen magas színvonalú — a bőséges problémákat felvonultató — könyv ez. Bemutatja az eddig elért eredményeket, de a nyitott kérdések is szerepet kapnak.

Az egyes fejezetek végén található mintegy 800 irodalmi hivatkozás, továbbá a kötet végén található további kb. 200 hivatkozás tovább emeli e kiváló könyv értékét a témával foglalkozók előtt.

Kiss Árpád

**Schlenker M., Fink M., Goedgebuer J. P.,
Malgrange C., Viénot J. C., Wade R. H. (eds):
Imaging Processes and Coherence in Physics**

A Springer Verlag 1980-ban kiadott könyve egy 1979-ben a franciaországi Les Houches-ben rendezett szakmai találkozó (workshop) előadásainak anyagát tartalmazza. A szervezők célja az volt, hogy a véleménycsere katalizálására egy asztal mellé ültessék azon szakembereket, akik különböző „részecskéket” (fotonok, elektronok, neutronok, ionok és fononok) használnak fel „leképezésre”. Különösen a lézer- és a nukleáris technika fejlődése tette lehetővé, hogy egyrészt ezen részecskék köre, amelyeket a leképezésben használtunk kiszélesedjen, másrészt a „képek” minősége jelentősen növekedjen.

Az előadók részletesen leírják a leképezéshez használható részecskenyalábok előállításával, ill. tulajdonságaival, a sugárzás és anyag kölcsönhatásával, amely a leképezésnél szerepet játszik, továbbá a képalkotással, detektálással és feldolgozással kapcsolatos legújabb eredményeket és lehetőségeket. A fotonok segítségével történő leképezés területén a Röntgen-tartománytól a látható spektrumon keresztül a rádiófrekvenciás (Mag Mágneses Rezonancia) tartományig tartó széles frekvenciaskála lehetőségeit ismerhetjük meg. Az elektronok, neutronok és ionok (csatorna-jelenség) leképezésre való alkalmazása különösen nagy fejlődésen ment át az utóbbi évtizedben, amit a könyv jól tükröz. Mivel a leképezésben a nyalábok koherencia-tulajdonságai fontos szerepet játszanak, ezekkel az előadók igen behatóan foglalkoznak.

A vázolt tematikát az előadók szerteágazóan és érdekesen mutatják be, ami ezt a kétségtelenül egzotikusan összehozott anyagot mind a fizikusok, mind az anyagtudományokkal vagy biológiai struktúrákkal foglalkozó szakemberek számára hasznos és érdekes olvasmánnyá teszi.

A gazdag és sokoldalú anyagot méltóan koronázza meg az utolsó előadás, ugyanakkor hűen fejezi ki a tanácskozás légkörét „A koherencia gyönyörű” címmel.

Króó Norbert

Coherent and Nonlinear Optics. Recent Advances

A Springer Verlag által 1980-ban kiadott könyv a rohamléptekkel fejlődő nemlineáris optika nehány, valóban az érdeklődés középpontjában álló, izgalmas kérdésével, illetve lehetőségével ismereti meg az olvasót.

Noha az optika alaptörvényeinek zöme közel egy évszázada született meg, a koherencia és nemlinearitás viszonylag új fogalmak, igen fontos szerepet játszanak a lézersugárzás és anyag kölcsönhatásainak leírásában. Alapvető szerepet játszanak azokban az — egyébként nagy számban ismert — módszerekben, amelyeket atomok és molekulák tanulmányozására az utolsó két évtizedben kidolgoztak. Ezek közül ismerhetjük meg különböző, a téma kiemelkedő képviselőiként ismert szerzők tollából azt a három területet [(1) koherens nemlineáris optika és koherens rezonancia effektusok; (2) többfotonos rezonancia folyamatok; (3) koherens Raman-szórási folyamatok] amelyek a témakör talán legizgalmasabb ágait jelentik.

Alapos leírásban ismerhetjük meg az ún. szupersugárzás (szuperradiance) jelenségét, melynek lényege, hogy egy atomokból vagy molekulákból álló rendszer spontán sugárzása sokkal intenzívebb lehet mint ugyanolyan számú izolált atomé. Az atomokat sugárzási terük csatolja egymáshoz és kooperatív módon sugároznak.

A koherens folyamatokon alapuló nagy felbontóképességű spektroszkópia legújabb lehetőségeit ismerhetjük meg a következő fejezetből, amely Doppler-kiszélesedéstől mentes, tehát igen keskeny nemlineáris rezonanciák mérésén alapul.

Intenzív lézersugárzás terében lehetőségük van az atomoknak arra, hogy két diszkrét nívójuk közötti átmenet egynél több foton szimultán abszorpciója eredményeként jöjjön létre. E témakört az utóbbi évtizedben igen kiterjedten vizsgálták. Ezen eredmények egy részét tárgyalja a könyv arra az esetre korlátozódva, amikor az n -foton átmenet során nem játszik szerepet közbenső rezonancia nívó.

A könyv következő témája a soknívós rendszerek (sokatomos molekulák) lézerfény segítségével való koherens gerjesztése. Elsősorban a jelenség elméleti vonatkozásait és a leíráshoz szükséges kvantummechanikai módszereket ismerhetjük meg a disszociációs küszöb alatti lézerintenzitások tartományában és abban az esetben, ha a molekulák közötti ütközések hatása a rotációs-vibrációs spektrumra elhanyagolható.

Ha a vizsgált molekulák kondenzált rendszerekben helyezkednek el, a szoros pakolás miatt gyors kölcsönhatás lép fel, amely a koherensen gerjesztett molekuláris rendszer fázis-deszinkronizálására vezet. E folyamatok relaxációs ideje a pikoszekundumos időtartományba esik, mérésekre móduszinkronizált lézereket alkalmazó spektroszkópai módszereket kell felhasználni. Ezek elméleti és kísérleti alapjait ismerteti meg a következő fejezet.

Végül a koherens Raman-spektroszkópia legújabb módszereinek (Koherens anti-Stokes Raman spektroszkópia, Raman indukált Kerr effektus spektroszkópia, indukált Raman spektroszkópia) leírását olvashatjuk gondos tálalásban.

A könyv elsősorban a nemlineáris optikai jelenségek területén dolgozó kutatók számára jelent hasznos olvasmányt, de ajánlható a modern optika iránt érdeklődő vagy azt oktató szakemberek számára is.

Króó Norbert

**Yu. N. Molin, K. M. Salikhov, K. J. Zamarev: Spin exchange
Principles and Applications in Chemistry and Biology
Springer Verlag, Berlin, 1980.**

A Springer kiadó fizikai-kémiai sorozatának 8. kötete a spin kicserélődés kémiai és biológiai alkalmazását tárgyalja; javított és tárgykörében szűkített kiadása a szerzők 1977-ben megjelent orosz nyelvű monográfiájának.

A könyv bevezető része ismerteti az alapjelenségeket: paramágneses részek spin állapotának cseréje, amit a partnerek között fellépő kicserélődési kölcsönhatás hoz létre olyan ütközések esetén, mikor elektronpályáik átfedésbe kerülnek. Az átfedés távolságfüggése következtében a kölcsönhatás is a részecskék távolságával exponenciálisan csökken. Oldatok esetén — a monográfia csak ilyen rendszereket tárgyal — a részek csak a van der Waals távolságra közelítik meg egymást, a kicserélődési kölcsönhatás gyenge (10^{14} rad/sec \sim .01 eV nagyságrendű), kisebb a termikus mozgás energiájánál; viszont a kicserélődés egyike a kevés elemi bimolekuláris folyamatnak, ami kísérletileg jól vizsgálható és elméletileg is leírható.

A második fejezet a spinkicserélődés elméletét foglalja össze; foglalkozik a kicserélődési integrál és a spincseré egyensúlyi állandójának számításával. A spin sűrűségmátrix formalizmus segítségével vezeti be a spinmozgás tárgyalását, ami adott rendszere átlagolva a makroszkópos mágnessézettség viselkedését írja le.

A harmadik rész a kísérletileg használt mágneses rezonancia (ESR) módszereket és a segítségükkel kiértékelhető információkat ismerteti. Folyamatos mikrohullámú besugárzásnál spektrum vonalak kicserélődési szélesedéséből és a rezonancia terek eltolódásából a koncentráció függvényében a „lassú” kicserélődés állandója határozható meg; nagyobb koncentrációknál a „gyors” folyamat kicserélődési keskenyedést eredményez. A dipoláris és egyéb hatások kettős rezonancia (ELDOR), ill. impulzus módszer (spin echo) segítségével, valamint viszkozitás és hőmérséklet változtatással különíthetők el.

A negyedik fejezet ismerteti a módszer alkalmazását paramágneses oldatokra és biológiai rendszerekre. Neutrális és töltött anion gyökök esetén a kísérleti eredményeket összeveti a gyors ütközési és a diffúziós spinmozgás elméletével.

A monográfia tárgyalásmódja alapos, világos, áttekinthető, használata ajánlható a témakörben dolgozó kutatók részére. *G. M.*

**Dobrinski (Krakau)—Vogel: Physik für Ingenieure
B. G. Teubner Stuttgart 1976.**

A fizika a műszaki tanulmányok során kettős feladatot tölt be. Egyrészt azokat a törvényszerűségeket kell közölnie, amelyek ismerete a műszaki problémák megoldásához szükséges; másrészt a fizikai gondolkodás elsajátításával a modern mérnököknek egy nélkülözhetetlen szellemi eszközt kell, hogy adjon a kezébe. A szerzők mindkét igénynek igyekeztek eleget tenni. Kellővük 8 számozott fejezetből áll és egy-egy alfejezet címe alatt ábrával szemléltetett rövid elméleti vagy kísérleti rávezetés után definíciókat és tételeket közöl, majd néhány feladatot tűz ki. A levezetésekben nem törekszik tudományos szigorúságra, de az eredményeket a gyakorlatban tökéletesen használhatóan fogalmazza meg.

A kinematika elején még csak az átlagsebességet nevezi sebességnek, ami megelőzi az egyenletes mozgás definícióját és a sebességvektor matematikailag pontos fogalmát. Egyenes vonalú mozgás dinamikájában tárgyalja Newton három axiómáját és a sűrűlódás törvényeit, majd a tehetetlenségi erőket általában. „Fölrendelt” fogalmaknak nevezi a munka, energia, teljesítmény és impulzus mennyiségeit. A forgómozgás dinamikáján belül beszél először tömegpontokról és merev testről; a centripetális és centrifugális erőt is itt tárgyalja. Ezután vezeti be a tehetetlenségi nyomatékokat és a forgató nyomatékokat és ide csatolja a Coriolis-erő fogalmát. Az első fejezet a folyadékok és gázok mechanikájával végződik.

A hőtán bevezetésében megvilágítja a fenomenológiai, energetikai, atomos és statisztikai tárgyalásmód közti különbséget. Főleg az első úton jár, de részletesen foglalkozik a kinetikus gázelmélettel.

Az elektromosságot és mágnességet hagyományosan az elektrosztatikával kezdi, aminek végén megemlíti a piezo- és piroelektromosságot. Ohm törvényét nemcsak kísérleti, hanem elméleti úton is megalapozza. Előbb használja a mágneses erővonalakat, azután definiálja a mágneses indukció mennyiségét. Levezeti a Maxwell-egyenletek integrál-alakját. Az elektromágneses indukció alkalmazásaként foglalja össze a váltakozó áramra vonatkozó tudnivalókat.

A sugároptikában a vastag lencsék kapcsán a fókuszokat is ismerteti, amiket az összetett lencsék eredő fókusz távolságának kiszámításához felhasznál. A fénysebesség Fizeau-féle mérésének külön alfejezetet szentel.

A rezgés tan és a hullámtan együttes tárgyalásában a háromdimenziós hullámok címén összefoglalja a hangtan, valamint a teljes elektromágneses spektrumot és végül a fotometria elemeit. Jellegetesen módon előbb értelmezi a Huygens-féle elv alapján a törés jelenségét és utána az interferenciát és a diffrakciót. A Doppler-effektus, a polarizáció és a fényelnyelés tárgyalása után a hullámok és részecskék dualizmusát mutatja be. Majd a Heisenberg-féle határozatlansági relációk képezik itt az átmenetet az atomfizikához.

Kiindul a szórás kísérletekből és bemutatja a Bohr-féle atommodellt, amit a négy kvantumszámmal tökéletesítve felhasznál a spektrumok értelmezésére. Itt ragadja meg az alkalmat a laserek működési elvének felvázolására. Az atom hullámmódellje alapján felírja az időtől független Schrödinger-egyenletet. Az atommag című szakaszban a radioaktív sugarakról, bomlási törvényekről és mérési módszerekről, valamint az atommag felépítéséről és az atommag átalakulásokról olvashatunk.

Külön fejezet foglalkozik a szilárdtestfizikával. Legfontosabb itt az, amit a kristályokról ír. Tárgyalja az energiasáv-modellt és az elektromos vezetést. Szigetelőkkel rövidebben, a félvezetőkkel bővebben foglalkozik. Megismerteti a tranzisztorok szerkezetével, működésével és alkalmazásával. A szupravezetés és a lumineszcencia jelenségeinek leírása, értelmezése és alkalmazása zárja be ezt a fejezetet.

Az utolsó, különálló fejezet címe a relativitáselmélet. Tulajdonképpen csak a speciális relativitásról van szó, amit a négyesvektorok elkerülésével, de következetesen épít fel. Tapasztalati kiindulással a kettős csillagok spektruma. Ezután a Lorentz-transzformációt és ennek legfontosabb következményeit vezeti le. A relativisztikus dinamika legfontosabb tételeit a gyorsulás transzformációjára építi. Végül az elektrodinamikában fellépő relativisztikus effektusokat tárgyalja.

Csoma Zsigmond

**Szabó Zoltán: Szerkezet és reakcióképesség (tizenkét előadás)
Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.**

A szerzőnek e műve azt a tizenkét előadásból álló előadássorozatának anyagát írja le, melyet az 1977/78 tanév első félévében adott elő speciálkollégium keretében a budapesti Eötvös Lóránd Tudományegyetem Természettudományi Karán. A mű a szerző 47 éves kutatómunkájának összefoglalását és áttekintését tartalmazza az anyagok szerkezetével és reakcióképességével kapcsolatban.

A mű terjedelme: 190 oldal.

Tanulmányozása felsőfokú, egyetemi, vagy főiskolai kémiai, fizikai és matematikai ismeretekkel rendelkező vegyész, vegyészmérnök, kémia tanár, gyógyszerész és biokémikus szakemberek részére ajánlott.

A mű célja: a szerkezet és reakcióképesség sokoldalú tanulmányozása. Közismert tény, hogy adott kémiai reakciók, adott anyagok egymással való reakciókészsége, illetve a szóbanjehető reakciók iránya, vagy egyensúlyi volta, döntően függ az egymással kémiai kölcsönhatásba vitt komponensek szerkezetétől (elektronszerkezet, halmazállapot, ionizált vagy elektromosan semleges atomi, illetve molekuláris formák, szolvatási állapot stb.), felületi szerkezettől, fizikai állapotoktól (nyomás, hőmérséklet, viszkozitás, elektromos állapot stb.) és az adott szerkezetet képző reakcióközeg egyéb fizikai-kémiai sajátosságaitól (aciditás, molekulák polárossága, katalizáló hatások). Éppen ezért a kémiai reakciók egyértelműen csak akkor vihetők végbe, ha igen körültekintően betartjuk az őket leíró közleményekben szereplő fizikai-kémiai körülményeket és feltételeket. Emiatt a vegyészeti területen ismerők még manapság is elsősorban empirián alapuló, „szakácskönyv-tudománynak” tekintik a kémiát.

E mű cáfolt rá erre az állításra, mely a reakcióképességnek a szerkezeti állapotoktól való függetlenségét a legkorszerűbb és legegyszerűbb fizikai-kémiai elméletek és kísérleti módszerek alkalmazásával sokoldalúan és komplex módon tanulmányozza. A könyv olvasói rádöbbenhetnek arra, hogy a ma kémiájának egzakttsága eléri a fizikáét. Egyben azt is megláthatják, hogy mit jelent az egyes kémiai folyamatok és az ezzel kapcsolatos molekulaszerkezetek több oldalról történő fizikai-kémiai tanulmányozása, különösen akkor, ha ezt egy ilyen nagy kémikus egyéniség gondolatvilágának és kutatási metodikájának tükrében ismerhetik meg.

E könyvet a tudomány- és technikatörténet iránt érdeklődők is hasznosan forgathatják. Sok kémiai folyamat megismerésének, illetve ipari vagy analitikai alkalmazásának fejlődéstörténetét is közli röviden a szerző. Például a 94. oldalon leírja, hogyan hatott a 40-es évek végén gyors fejlődésnek indult alumíniumipar a komplexképzésen alapuló analitikai eljárások kutatásának ugrásszerű fejlődésére.

A mű sok vegyipari és analitikai érdekességet is tartalmaz. Például, hogyan lehet fémalumíniumot alumínium-karbid mellett meghatározni (100. oldal.) vagy Si meghatározása alumínium-oxidban 0,01 %-nál kisebb Si-tartalom mellett, (127. oldal). A szerző még biokémiai problémákkal is foglalkozik, mint pl. a sósav gyomorban történő keletkezésének ioncserén alapuló mechanizmusával (96. oldal).

A mű egyébként igen nagy irodalomjegyzékkel és gondosan összeállított név- és tárgymutatóval rendelkezik.

Jeszzenszky László

**H. Walther and K. W. Rothe (eds): Laser Spectroscopy IV.
Springer Verlag, 1979.
A Springer kiadó „Optical Sciences” sorozat 21. kötete**

Lehet-e bíráló megjegyzésekkel illetni egy olyan könyvet, melyet az ismertetés írója azzal a jó érzéssel tett le, hogy több új ismeretet kapott a lézerfizikáról és annak legújabb alkalmazásáról, mint amit többszáz folyóirat áttanulmányozásakor összegyűjthetett volna? Végsősoron igen, mivel a cím alapján nem erre számított, s ez azt is jelezheti, hogy lényegesen kevesebben forgatják majd mint érdemes lenne, hisz címe alapján elsősorban spektroszkópusok kezébe kerül.

A könyv az 1979. június 11–15. között Rottach–Egern-ben (NSZK) tartott IV. Lézeres Spektroszkópia Konferencia meghívott és postdeadline előadásainak kiválóan rövidített formáit tartalmazza. A tartalom áttanulmányozása azonban világosan mutatja, hogy a cím csak jó ürügy volt arra, hogy a rendezők (egyben a könyv szerkesztői) az összejövetelt a lézerfizika legérdekesebb új eredményeit összefoglaló konferenciává változtassák. A nagyszámú meghívott előadás összefoglalása pedig kiváló alkalom arra, hogy ismeretlen területek lényegét, sok részeredményt tartalmazó cikkek átolvasása helyett, a legavatottabb szakértők lényegretörő leírásából ismerhessük meg.

A konferencia elnevezésének megfelelően valóban az előadások kb. 50%-a lézeres spektroszkópiával foglalkozik. Értelemszerűen nem kézikönyvekbe való adatokkal, hanem a lézerek spektroszkópiában való felhasználhatóságának lehetőségével, az új mérési módszerek leírásával. A konkrét minták, számszerű eredmények csak a módszerek alkalmazhatóságát igazolják, pontosságát bizonyítják.

A lézerek spektroszkópiái alkalmazhatóságát a viszonylag keskeny sávzélesség és a gerjesztő fény nagy spektrális intenzitásúrsága indokolta kezdetben. A technikai fejlődés azonban új lehetőségeket tárt fel. Mint az az előadások számszerű eloszlásából kitűnik, jelentős szerep vár a gyakorlati spektroszkópiában a telítési spektroszkópián túl az ultraövid lézerimpulzusok nyújtotta nagy időfelbontásnak, a különleges elrendezésekkel megvalósítható Doppler-mentes detektálás lehetőségének. Néhány, a rádiófrekvenciás tartományra utaló előadás mellett meglepően jelentős a magasan gerjesztett Rydberg-állapotok spektroszkópiájának szerepe. Külön fejezet foglalkozik a fizika általános alapkérdéseinek spektroszkópiái vetületeivel mint pl. az általános relativitáselmélet, vagy a tér izotropitásának bizonyíthatóságával. Az alkalmazott lézerspektroszkópia jelentős területévé válhat, akár iparszerű formában is a lézeres izotópszeparáció.

A könyv másik fele — mint említettük — a lézerek felhasználása során tapasztalt új fizikai jelenségekkel foglalkozik, csak jól elrejtették azokat a spektroszkópiái fejezetcímek alá. Ilyen pl. az első részben a lézeres hűtés lehetősége. A sokfotonos disszociáció és gerjesztés, valamint a nemlineáris optika szerepe külön fejezetet kapott, ugyanígy az egyik legérdekesebb új optikai jelenség az optikai bistabilitás és a hozzá kapcsolt szupersugárzás.

A „Lézerspektroszkópia alkalmazásai” fejezetcím alatt húzódik meg egy kiváló előadás a fázis konjugált optikáról és ugyancsak jelentős az atommagok lézerrel történő orientációját tárgyaló rész.

A IX. fejezet az új lézerek közül ismertet néhányat. A legjelentősebbnek F. P. Schäfer előadása tűnik aki végig, szegedi kollégánk, Bor Zsolt által kidolgozott ultrarövid fényimpulzusokat szolgáltató festéklézerrel foglalkozik.

A határidőn túl elfogadott cikkek nagy része már valóban új spektroszkópiái eredményeket tartalmaz, de a szerkesztők (program bizottság) itt is zöld utat adtak olyan nagy jelentőségű, új, nem kifejezetten spektroszkópiái eredményeknek mint pl. az „optikai diódák” megvalósításának. Itt pott jelentős terjedelmet a kialakulóban levő opto-akusztikai spektroszkópia is.

Összefoglalásként megállapíthatjuk, hogy a könyv és ennek alapján a konferencia a legújabb spektroszkópiái eredmények ismertetésén túl, véleményünk szerint igen helyesen, nem korlátozódott a címben jelölt témára, s melegen ajánlhatjuk mindenkinek, akit érdekelnek a modern optika egyéb új eredményei.

Horváth Zoltán György

**R. Hachstrasser, W. Kaiser, C. V. Shank (eds): Picosecond Phenomena II.
Proceedings of the Second International Conference on Picosecond Phenomena
Cape Cod, Massachusetts, USA, June 18–20, 1980.
Springer Verlag, Berlin Heidelberg New York 1980.**

E kötet a „Springer Series in Chemical Physics” sorozat 14. kötete, mely az Amerikai Fizikai Társulat által a fent jelzett helyen és időben „Pikoszekundumos jelenségek” címmel megtartott konferencia előadásainak anyagát tartalmazza.

Milyen kutatási tevékenységet is jelent a „Pikoszekundumos jelenségek” címszó?

Röviddel a laserek felfedezése után a tudományban egészen új típusú kutatási területeken nyitott meg új lehetőségeket azon tény, hogy bizonyos laserekkel igen intenzív (Gigawatt = 10^9 Watt), igen rövid időtartamú (pikoszekundum = 10^{-12} sec \equiv ps) fényimpulzusok előállítása vált lehetővé. Fizikusok, vegyészek, biológusok és mérnökök azonnal felismerték, hogy ilyen laserimpulzusok lehetővé teszik különféle extrém gyors folyamatok direkt időbeli tanulmányozását, természetesen megkövetelve azonban megfelelő, forradalmian gyors optikai és elektronikai mérőberendezések kifejlesztését is. Az alapkutatások számára a ps-os laserimpulzusok előállítása rendkívül fontos lépés volt, mivel így lehetővé vált az atomok és molekulák folyadékokban, vagy szilárd testekben történő, ps-os időskálán végbemenő mozgásainak direkt mérése: az adott anyagi közeg egyensúlyát egy intenzív laserimpulzussal szétrombolva mérni lehet az egyensúly helyreállításához szükséges időtartamot ps-os technikával.

A könyv 8 részből áll.

Az „I. Rész” a ps-os laserimpulzusok előállítása terén elért legújabb eredményeket ismerteti. Megismerhetjük azokat az új laseranyagokat (pl. foszfátüveg, festékek, különböző félvezetők stb.), Q-kapcsoló anyagokat, Q-kapcsoló eljárásokat, amelyekkel igen stabil, reprodukálható tulajdonságú ultrarövid laserimpulzusokat lehet nyerni, különös tekintettel a félvezető laserekre. Így pl. olyan rövid laserimpulzust állítottak elő, mely minősége 60 optikai ciklust tartalmaz.

A „II. Rész” az optoelektronika területén elért új eredményeket tartalmazza: kapcsolások, modulálás, mintavevés a ps-os időskálán.

A „III. Rész”-ben a molekuláris mozgások ps-os vizsgálatairól olvashatunk. Lehetővé vált a molekulák orientációs, polarizációs kinematikájának és dinamikájának tanulmányozása különféle oldatokban, keverékekben, Kerr-anyagokban.

A „IV. Rész” a ps-os relaxációs jelenségekről szól igen részletes terjedelemben. Az egyes munkák a ps-os sugárzásos, ill. sugárzás nélküli relaxációs folyamatokkal, a vibrációs és rotációs molekuláris relaxációkkal, a ps-os „foton-echo”-val, az ultrarövid fázisszéteséssel járó folyamatokkal foglalkoznak. Ezek közül több jelenséget már „szubpikoszekundumos” időtartamok alatt tudtak észlelni.

„V. Rész”: Ps-os kémiai folyamatok. E részben a kémiai folyamatok tanulmányozása során talált rendkívül érdekes új, ultragyors folyamatok felleléről olvashatunk. Így a fotokémiai dinamikában lejátszódó ps-os elektron-relaxáció szerepéről, az ultragyors fotoionizáció fotoelektronjainak oldatba kerüléséről, vagy az oldatok fotodisszociációját követő rövid élettartamú állapotok töltés-transzfer folyamatairól. Több munka foglalkozik a ps-os töltés-transzfer: különös tekintettel a proton-transzfer jelenségekkel. Érdekes új eredményeket találunk a szabad gyökök gyors kialakulásáról, vagy az ultragyors fotoizomér folyamatokról.

A „VI. Rész” szilárdtestfizikai alkalmazásokat ismert. Különböző félvezetők ps-os nemlineáris spektroszkópiájáról, fotovezetéséről, fázisátalakulásairól, foton-echojáról, exciton-polariton kollektív részecskéik diszperziós görbéinek kísérleti meghatározásáról olvashatunk érdekes eredményeket.

A „VII. Rész” a ps-os impulzusok egyik legújabb és legérdekesebb alkalmazásáról ad képet: a ps-os biológiai folyamatok tanulmányozásáról. Rendkívül érdekesek és ígéretesek a különféle, az élő szervezet elemeit alkotó biológiai egységekben lejátszódó ps-os jelenségekről szóló tanulmányok, így: egyes baktériumok proteinjének gyors elektron-transzferje, a fotoszintézissel bíró, továbbá a biológiai festékanyagok, vagy a DNA szerkezetekben lejátszódó jelenségekre vonatkozó kísérletek új eredményei.

Végül a „VIII. Rész” zárja a kötetet különféle hasznos, az előzőekben felsorolt vizsgálatokban alkalmazható ps-os gyors spektroszkópiai módszerek ismertetésével.

Összefoglalásképpen elmondhatjuk, hogy a kötet a címben megjelölt témakör legújabb eredményeit tartalmazza, melyeket a terület nemzetközileg elismert legkiválóbb kutatói értek el. Az anyag a konferencia-kiadvány természetéből következően nem lehet rendszeres didaktikai szerkezetű.

Az ismertetett eredmények újszerűsége, magas szintje további vizsgálatokat elindító stimuláló hatása azonban biztosítja a könyv hasznosságát különösen azon kutatócsoportok számára, melyek hazánkban is egyre eredményesebben működnek. (F. Gy.)

W. Schumann—M. Dubas: *Holographic Interferometry*
From the Scope of Deformation Analysis of Opaque Bodies
Springer Series of Optical Sciences Volume 16.
Springer-Verlag 1979.

Mint a könyv címe is mutatja, az a célja, hogy összekapcsolja az optika és mechanika azon fejezetét, amelyek a holografikus interferometriának az átlátszatlan testek deformációs analízisére való alkalmazásában szerepet játszanak.

A bevezetés után a második fejezet a differenciálgeometria és kontinuum mechanika alapformáit ismerteti. Elsőnek a későbbiekben szükséges differenciálgeometriai és vektor és tenzor analízis elemeit ismerteti. Majd a deformáció kinetikája következik: deformáció, megnyúlás, összehúzó-dás, rotáció és elmozdulás kapcsolata, és mindezek alkalmazása egy test felületére.

A harmadik fejezet a holografikus kép keletkezésével foglalkozik. Először a standard hologram készítést és rekonstrukciót tárgyalja pontszerű fényforrás és kiterjedt tárgy esetén. Már itt kitér arra, hogyan lehet két vagy több hullámfrontot ugyanazon a fotolemezen rögzíteni. Ezt azután egyidejűleg rekonstruálva a két hullámfront interferálni képes. — Majd a kép keletkezését tárgyalja abban az esetben, ha rekonstrukciókor az optikai elrendezést változtatjuk: vagy a rekonstruáló fényhullám nem azonos a referenciahullámmal, vagy pedig a hologramot mozdítjuk el rekonstrukciókor.

Ezután következik a 4., a fő fejezete a könyvnek: az interferencia csíkok értelmezése a holografikus interferometriában. A lényeg az, hogy két nem egyidejűleg létező hullámfront interferáltatható. Több technika ismeretes: ha a rekonstruált hullámteret egy „ténylegesen létező” térre szuperponáljuk ez a „real-time” vagy „élő csík” technika. A másik „kettős-expozíciós” vagy „befagyasztott csík” technikánál mindkét hullámot ugyanazon a hologramon rögzítik egymás után és egyidejűleg rekonstruálják. A harmadik „idő-átlagoló” technikánál egy oszcillációs folyamat által keltett összes hullámot egyszerre rögzítik és rekonstruálják.

Ezután következik az interferencia jelenség leírása két fénysugár közti útkülönbséggel, ami azon két pont közti elmozdulás vektortól függ, ahová ezek a sugarak tartanak. Ez a vektor a csíkok segítségével mérhető. Mélyebben analizálva az interferenciaképet, szerepet kapnak az optikai útkülönbség és ezzel az elmozdulás első deriváltjai vagyis a dilatációs és rotációs tenzorok, amelyek a mérnököt a legjobban érdeklik. A 4. fejezet utolsó része avval foglalkozik, hogyan jelennek meg a fentebb leírtak, ha rekonstrukciókor változtatjuk az optikai elrendezést.

Az 5. fejezet az elmozdulás és az optikai útkülönbség második deriváltjaival foglalkozik, amelyek az interferencia csíkok görbületével kapcsolatosak. Azt is megmutatja, hogyan használhatók fel ezek arra, hogy a felszínen meghatározott mechanikai mennyiségeket extrapoláljuk a test belsejébe.

A könyv érdeklődésre tarthat számot mind az elméleti sszakemberek, mind a gyakorlati alkalmazásban érdekelt mérnökök számára.

Mátrai Mária

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat nyomdába érkezett: 1981. június 3. — Terjedelem: 7,35 (A/5 iv)

81-2864 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADEMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

Groma Géza: Fázisátalakulások a nemesíthető, közepes szilárdságú AlZnMg ötvözetekben ... 103

KÖNYVISMERTETÉS

<i>F. Beleznyay, G. Ferenczi, J. Giber (ed.-s): New Developments in Semiconductor Physics</i>	177
<i>K. A. Müller H. Thomas: Structural Phase Transitions I. The Computer in Optical Research</i>	
The Computer in Optical Research	177
Inverse Scattering Problems in Optics	179
<i>Schlenker M., Fink M., ... Wade R. H. (ed.-s): Imaging Processes and Coherence in Physics</i> ..	179
Coherent and Nonlinear Optics. Recent Advances	180
<i>Yu. N. Molin, K. M. Saliknov, K. J. Zamarev: Spin Exchange</i>	181
<i>Dobrinski — Vogel: Physik für Ingenieure</i>	182
<i>Szabó Zoltán: Szerkezet és reakcióképesség</i>	183
<i>H. Walther K. W. Rothe (ed.-s): Laser spectroscopy IV</i>	184
<i>R. Hachstrasser, W. Kaiser, C. V. Shank (ed.-s): Picosecond Phenomena II</i>	184
<i>W. Schuman — M. Dubus: Holographic Interferometry</i>	185

357.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

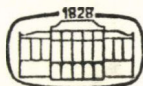
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

NEMATIKUS ÉS SZMEKTIKUS-A SZERKEZETŰ FOLYADÉKKRISTÁLYOK MIKRODINAMIKÁJA*

BATA LAJOS

MTA Központi Fizikai Intézet, Budapest

TARTALOM

Előszó	188
Bevezetés	189
I. TERMODINAMIKAI TULAJDONSÁGOK ÉS A SZERKEZETEK VIZSGÁLATA ..	192
1. A folyadékkristály anyagok kiválasztása	193
2. Termikus tulajdonságok vizsgálata	193
3. Szerkezetek és texturák vizsgálata	197
II. AZ IRÁNYRENDEZETTSÉG ÉS A DIELEKTROMOS ANIZOTRÓPIA	200
1. Elméleti alapok	200
2. Kísérleti vizsgálatok és következtetések	202
3. A termikus és dielektromos vizsgálatok kapcsolata a gyakorlati alkalmazásokhoz ..	205
III. MOLEKULA DINAMIKAI VIZSGÁLATOK	207
1. Dielektromos relaxációs vizsgálatok	208
1.1 Elméleti alapok	208
1.2 Kísérleti vizsgálatok	209
1.2.1 Keverék vizsgálata	209
1.2.2 Egykomponensű anyagok vizsgálata	212
1.2.3 Szmetikus-A és nematikus állapot vizsgálat, fázisátmenetek	213
2. A kvázi-rugalmas neutronszerzés vizsgálata	215
2.1 Elméleti alapok	215
2.1.1 Bolyongás körpályán	216
2.1.2 Bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel	218
2.1.3 Bolyongás reflektáló falú pályán	220
2.2 Kísérleti vizsgálatok	220
3. A dinamikai jelenségek egységes értelmezése	229
4. A dielektromos relaxációs idő és a viszkozitás kapcsolata	231
4.1 A csavar vagy feszítési viszkozitás mérése	233
4.2 A relaxációs idők összehasonlítása	236
IV. A FOLYADÉKKRISTÁLYOK GYAKORLATI ALKALMAZÁSAIÉRT	238
1. Kijelző cellák előállítás	239
2. A kijelzőkben használatos effektusok vizsgálata	240
3. A készített kijelző típusok	243
4. Az ipari és a mezőgazdasági hasznosítás perspektívái	243
V. ÖSSZEFOGLALÁS, TÉZISEK	244
A. A kitűzött feladat és előzményei	244
B. Vizsgálati módszerek	244
C. Új tudományos eredmények	245
C.1 Termodinamikai tulajdonságok és szerkezetek vizsgálata	245
C.2 Irányrendezettség és dielektromos anizotrópia	245
C.3 Molekuladinamikai vizsgálatok	245
KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS	248
IRODALOM	248

* Doktori értekezés, 1980. jan. 31.

ELŐSZÓ

A szilárdtest kutatások egyik legfiatalabb és nagy jövő előtt álló ága a szerves molekulákból felépülő részben rendezett anyagok fizikája. Az a két terület, ahol e téren az elmúlt évtizedben a legnagyobb fronttörlést sikerült elérni, az a folyadékkristályok és szerves félvezetők fizikája.

1968 óta igen széles sávban és nagy intenzitással indultak be a folyadékkristály kutatások. Ez nemcsak a téma elvi érdekességéért, hanem elsősorban a gyakorlati és tudományos alkalmazásai iránt megnyilvánuló széles körű érdeklődésért tulajdonítható.

Egy pillanatra sem kétséges ezeknek a kutatásoknak a gyakorlati jelentősége az elektro-optikai kijelzők és a felületi hőmérséklet megjelenítetése területén. A folyadékkristály anyagok új vizsgálati lehetőséget biztosítanak a legkülönbözőbb tudományágaknak, új területet jelentenek a szilárdtestfizikai leírási mód és vizsgálati módszerek számára, magában hordva a kiterjesztés lehetőségét biológiai rendszerek irányába is.

A KFKI vezetősége 1972-ben határozta el, hogy ezen a területen is beindítja a kutatásokat. Ekkor kaptam megbízást a téma beindításának megtervezésére, a kutatási programjának kidolgozására, melynél figyelembe kellett venni a KFKI adottságait és a kutatások iránt várhatóan megnyilvánuló társadalmi hasznosítási igényeket. 1972 végén a téma elindításához magyar nyelvű jegyzetet [1] tettem közzé. Megindítottuk az anyagok szintetizálását és fiatal fizikusok kapcsolódtak a témához. Az OMFB és a KFKI kutatási-fejlesztési szerződést kötött „A folyadékkristály anyagok kutatása és kijelzők fejlesztése” témára. A téma része lett az „Elektronikai alkatrészek kutatása-fejlesztése” programnak, mely az Országos Távlati Tudományos Kutatási Tervben K-7 számon kiemelt célprogram. A program keretében hételemes, alfanumerikus és mátrix kijelzők laborpéldányait hoztuk létre. A gyakorlati alkalmazások tudományos háttérének biztosításához a KFKI-ban már meglevő adottságokra (neutronspektroszkópia, NMR) építve új kutatási módszerek (elektro-optika, dielektromos relaxáció, DSC, vékonyréteg technológia) bevezetésével viszonylag széles anyagkutatást indítottunk be. A kutatások beindulása után széles körű ismeretterjesztő munkát kezdtünk a téma hazai elterjesztésére [2], [3]. Az elmúlt három évben egy-egy hetes „folyadékkristály iskolát” szerveztünk, mely után jó munkakapcsolat alakult ki számos hazai intézmény MÜKI, HIKI, REANAL és egyetemi kutatóhelyekkel (JATE, BME, SOTE stb.).

Elindítottuk és szervezzük a téma iránt érdeklődők együttműködését, ami a Szilárdtestfizikai Komplex Bizottság és a Szilárdtest Kutatásokat Koordináló Tanács támogatásával egyre jobban kiszélesedik.

A nemzetközi konferenciákon is aktívan résztvettünk. A szocialista országok kutatói között együttműködést alakítottunk ki és elkezdtük kétévenként külön konferenciák szervezését.

A disszertációmban a folyadékkristály kutatásaink során a termodinamikai, molekuláris dinamikai, a molekuláris és makroszkopikus jelenségek kapcsolata terén elért tudományos eredményeimet és a hazai alkalmazások elterjesztéséért kifejtett fejlesztési tevékenységemet mutatom be.

A terjedelem csökkentése miatt nem írtam általános irodalmi összefoglalót,

mert magyar nyelvű közleményekten [2], [3], [4] és magyar nyelvű könyvekten [1], [5] ezt részletesen megtettem.

A munkám értékelésének megkönnyítése céljából kétféle irodalmi hivatkozást alkalmaztam. Saját munkára számmal, idegen munkára a szerző kezdőbetűivel és az évszámmal hivatkoztam.

BEVEZETÉS

Hosszúvás, szivar vagy elnyúlt korong alakú molekuláktól felépülő szerves anyagok molekuláinak elhelyezkedését kristályrácsban a tömegközéppont háromdimenziós rendezettsége mellett a molekulák tengelyeinek irányrendezettsége — más szóval a translációs rend mellett az orientációs rend is jellemzi.

A hőmérséklet emelése során a kristály teljes rendezettsége ezeknél az anyagoknál nem egyszerre szűnik meg, a molekulák tömegközéppontja úgy lesz két- vagy egydimenziós rendezettségű vagy teljesen rendezetlen, hogy közben valamilyen irányrendezettség mindvégig fennmarad. Az ilyen sajátsággal rendelkező anyagokat folyadékkristályoknak hívjuk. Ezzel az elnevezéssel jelezni kívánjuk, hogy ez az állapot a kristály és a folyadékállapot között lép fel. Ilyen anyagok makroszkopikus tulajdonságai valóban két állapot tulajdonságaiból tevődnek össze; optikailag a kristályokhoz hasonlóan anizotropak, folyékonyságuk bizonyos irányokban a folyadékokéhoz hasonló. Magasabb hőmérsékleten természetesen ezek az anyagok is izotrop folyadékok lesznek.

A hőmérséklet emelése során többnyire a molekulák végeinél „gyengülnek el” a kristályban uralkodó kötések, így az anyag réteges szerkezetű lesz. A réteges állapotot szmeztikus folyadékkristály állapotnak nevezzük. A szmeztikus állapotban belül számos szerkezetet sikerült már megfigyelni.

A szmeztikus-E szerkezetűen a hexagonális kristályrács a „c” tengely irányában fellazul, de az „a” és „b” tengelyek irányában olyan rendezett mint az eredeti kristályban (csak a rácsállandók kis mértékben módosulnak).

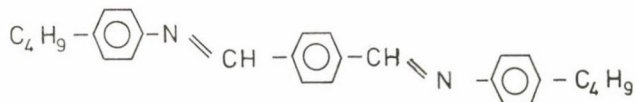
A szmeztikus-B szerkezetűen a molekulák vagy csak a molekulák végén levő gyökök hossztengetyűk körül foroghatnak, de tömegközéppontjuk háromdimenzióban rendezett marad.

A szmeztikus-A szerkezetűen a molekulák tömegközéppontjai egymás felett levő síkokban ülnek, de a síkon belül már rendezetlenek, miközben a hossztengetyűk a síkokra merőlegesek, azaz irányrendezettek.

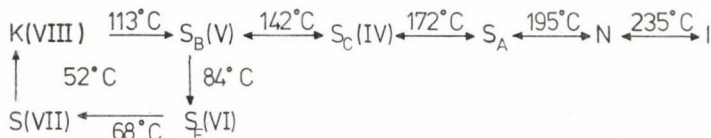
A szmeztikus-C szerkezetűen a molekulák tömegközéppontja a szmeztikus-A szerkezethez hasonló elhelyezkedésű, de a hossztengetyűk a síkokra nem merőleges, hanem irányrendezetten ferde szögű. A különböző szmeztikus szerkezeteket S_A , S_B , S_C , ... betűkkel jelöljük.

Nematikus szerkezetűen a molekulák tömegközéppontjának síkba rendeződése is már megszűnik, (a folyadékokhoz hasonlóan), teljesen rendezetlen lesz, a hossztengetyűk rendezettsége azonban megmarad. Optikailag aktív molekulák irányrendezettsége a molekulák rövid tengelye irányában periodikusan változik és csavart nematikust, más szóval koleszterikus szerkezetet mutatnak. Az eddig elmondott szerkezeteket röntgen- és polarizációs mikroszkópos vizsgálatokkal állapították meg.

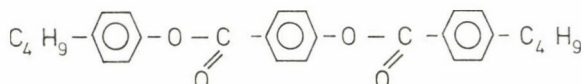
Az elmondottak illusztrálására a tereftál-bis-butil-anilint, röviden TBBA-t:



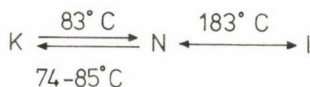
hozhatnánk fel példaként, mely a hőmérséklet-változás során



fázisátmereteken megy keresztül. A nyilak a hőmérsékletváltozás irányát, a számok az átalakulás hőmérsékletét mutatják. Ez a molekula a három tenzolyűrű mentén egy merev törzssel rendelkezik, melyen felül $-\text{C}=\text{N}-$ kötések irányában a végek felé $30^\circ-40^\circ$ -os szögű $\mu=5,36 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ momentummal elektromos dipól mutat. Teljesen hasonló molekula a DB-FBB, vagyis a



a dibutil származéka a fenil benzoiloxi benzoátnak, mely

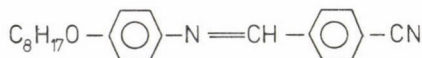


fázisátmereti sémát mutatja, tehát rem rendelkezik annyi mezofázissal, mint a TBBA. A $-\text{O}-\text{C}(=\text{O})-$ dipólmomentuma $\mu=5,3 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$ és a paratengellyel 53° -os

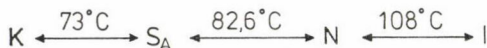
O

szöget zár be. K, N és I a kristályos, nematikus és izotrop állapotokat jelölik.

Magyarázhatnók a fázisátmereteken tapasztalt különbségeket a dipólok irányának, nagyságának, elhelyezkedésének és a mozgásuknak különbözőségével. A molekula alkotóelemei mozgásának lehetőségeit, az azt meghatározó kölcsönhatásokat még nem ismerjük, ezért többnyire csak egy-két fázisátmeretet mutató anyagmintákat választunk a meghatározott célú vizsgálatokhoz. A nematikus-szmeztikus-A fázisátmeret vizsgálatokhoz általában ciano-benziliden oktiloxi anilint, röviden CBOOA-t;



választják, mely fázisátmereteinek sémája



A szmektikus-A szerkezet kialakulásában az alkil lánc játszik nagy szerepet, mert amíg a $-C_nH_{2n+1}$ láncban $n \leq 7$, az anyagok nematikusak, $n \geq 8$ esetén pedig szmektikusak. A szmektikus-A szerkezet megjelenését *McMillan* [Mc71] értelmezte az alkil lánc hosszának hatásával. A szmektikus-C szerkezet kialakulását egyes kutatók [Mc73], [Ca77] a molekula törzsten elhelyezkedő dipólok között fellépő kölcsönhatások segítségével értelmezik, míg *Wulf* [Wu75] a molekula alakjával és a térkitöltési sajátágaival hozza kapcsolatba.

A többi folyadékkristály szerkezet létrejöttének magyarázatához még keveset tudunk. A molekuladinamikai és fázisátmeret vizsgálatok éppen azt a célt tűzik maguk elé, hogy megállapítsák a különböző szerkezetektől létrejövő mozgásokat és az uralkodó kölcsönhatásokat. Ezekhez a vizsgálatokhoz több módszert használhatunk fel, ezek közül a dielektromos relaxáció, a rugalmatlan neutronsórás, az NMR, a Raman spektroszkópia és az elektro-optikai módszereket említhetném.

A nyugat-európai (francia-angol) kutatók a molekula dinamikai vizsgálatokat a szmektikus állapotok tanulmányozásával kezdték el. A végláncok deuterizálásával rugalmatlan neutronsórás segítségével megállapították, hogy TBBA-ban szilárd állapotban $\tau = 14,3 \cdot 10^{-12}$ s relaxációs idővel a metil csoport forog [He75], S_B szerkezetben $\tau = 7,9 \cdot 10^{-12}$ s relaxációs idővel már az etil csoport is forog [Vo76], míg mérésük szerint a molekula törzs mozgása a különböző (S_H , S_B , S_C) szerkezetekben nem változik lényegesen. Más [Le76] mérések azt mutatták, hogy S_E szerkezetben a molekula hossz tengelye körül, két helyzete között, $5 \cdot 10^{-10}$ s relaxációs idővel átfordulhat.

A kvantum-kémiai számolások és az NMR-mérések kétséget ébresztettek a TBBA-molekulán kapott mérési eredmények értelmezésével kapcsolatban. Kvantum-kémiai számolások szerint ugyanis a TBBA-molekula törzse nem tekinthető egységesen merevnek, a középső benzolgyűrűvel jelölt rész elég szabadon foroghat, a neutron spektroszkópiai méréseknél ennek hatását pedig nem választották le és ezért nem tapasztalhattak változásokat a fázisátmenetek során. NMR mérések [Ze77] szerint a molekula hossz tengelye körül már S_C szerkezetben sem foroghat „szabadon”. A dipólok mozgását közvetlenül még nem vizsgálták ezekben a szerkezetekben.

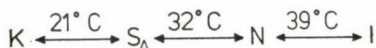
A különböző folyadékkristály-állapot létrejöttét meghatározó kölcsönhatásokat azért is nehéz még megállapítani, mert a különböző módszerekkel kapott molekuladinamikai vizsgálatok eredményei ellentmondani látszanak egymásnak, így az anyagokban lejátszódó mikrodinamikai folyamatokat egységes fizikai képte még nem sikerült összefogni.

A mikrodinamikai vizsgálatainkat én célszerűbbnek találtam nematikus szerkezetű anyagokon elkezdni, majd ezeket S_A , ..., szerkezetet mutató anyagokra fokozatosan kiterjeszteni. A választásomat arra alapoztam, hogy ezek a szerkezetek gyakorlati szempontból a jelentősebbek, a mikrodinamikai vizsgálatukhoz is több módszer használható, az állapot fizikai sajátságairól is többet tudunk, továbbá a vizsgálatok során szerzett anyagismereteinket a gyakorlati hasznosításokat szolgáló eszközök készítésénél is felhasználhatjuk. E vizsgálatok mellett feladatomnak tekintettem, hogy a különböző mérési módszerrel megállapított fizikai folyamatokat egységes fizikai képpen értelmezsem. Ezekhez a vizsgálatokhoz úgy választottam meg az anyagmintákat, hogy ezek egyrészt a mások által vizsgált anyagokhoz hasonlóak legyenek (pl. TBBA és DB-PBB), másrészt a vizsgált jelenség szempontjából egy-

értelműbb feleletet adjanak. Az oktil-ciano bifenilnek, röviden OCB-nek, azaz



nek fázisátmeretei



a CBOOA-éhoz hasonló, de mivel csak hossztengety irányába mutató dipólmomentuma ($13,3 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$) van, a dielektromos vizsgálatokhoz egyelőre alkalmasabbnak tűnik.

Az első feladat folyadékkristály-vizsgálatoknál mindig az, hogy a szintetizált anyagoknál megállapítsuk a fázisátmeretek hőmérsékletét és termodinamikai jellemzőit, az észlelt fázisok szerkezetét, a dielektromos anizotrópiájuk előjelét. Az előbbieket Perkin—Elmer DSC—2 (Differential Scanning Calorimeter) kaloriméterrel és polarizációs mikroszkóppal, az utóbbit röntgendiffrakcióval és polarizációs mikroszkóppal, illetve a dielektromos tulajdonságokat megfelelő mérőhidakkal mérhetjük ki. A disszertáció I. és II. fejezetében ilyen vizsgálatokról számolok be. Ezek a mérések, amellet, hogy többnyire újak, a további vizsgálatok alapját is képezik.

A dipólok helyzetét dielektromos anizotrópia, a mozgásuk jellemzőit dielektromos relaxáció vizsgálatával állapíthatjuk meg. Eddig egy mérést leszámítva csak nematikus állapotban vizsgálták a dielektromos relaxációt, a III. fejezet 1. pontjában a nematikus és szmektikus-A állapotban végzett méréseinket és a kapott eredmények értelmezését mutatom be.

A molekula egészének, vagy annak egyes részei mozgásának megállapítására rugalmatlan neutronszerzés és mágneses rezonancia méréseket végeztünk. A III. 2. pontban a folyadékkristály-vizsgálatokhoz összeállított neutron spektrométeren végzett méréseinket mutatom be, melyek értelmezéséhez először új típusú modellt használtam, majd ennek pontatlanságát látva új modellt dolgoztunk ki. A bolyongás gömbfelületen modell alkalmazása lehetővé tette, hogy kimutassam a molekulák billegő-forgó mozgását.

A III. 3. pontban a neutronszerzés és a dielektromos mérések alapján kapott eredményeket egységesen fizikai képté építem fel. A III. 4. pontban a lényegében mikrodinamikai vizsgálatok alapján kapott relaxációs időt összekapcsolom a csavar és feszítési viszkozitással, azokkal az anyagi paraméterekkel, melyek meghatározzák a kijelzőkén lejátszódó tranziens folyamatokat.

A IV. fejezetben a folyadékkristályok hazai alkalmazásaiért kifejtett tevékenységünket és a kutatásainkat vázolom.

I. TERMODINAMIKAI TULAJDONSÁGOK ÉS A SZERKEZETEK VIZSGÁLATA

Amikor a folyadékkristályos tulajdonságot mutató anyagot a kezünkbe vesszük, az első, amit tudni akarunk, hogy mely hőmérséklet-tartományban, milyen folyadék-kristály-állapottal rendelkezik. Ezután megnézzük a molekula szerkezeti kápletét,

törzsének merevségét, a dipóljainak nagyságát és helyzetét stb., vagyis molekuláris tulajdonságok alapján próbáljuk megfejtetni a megfigyelt állapotokat. A megállapításainkra mindjárt ellenpéldákat is találunk és felmerül a szisztematikus vizsgálatok szükségessége, melyhez megfelelő anyagminták kellenek.

1. A folyadékkristály anyagok kiválasztása

A vizsgálatokhoz célszerű makroszkópiusan rendezett anyagmintát, „egykristályt” előállítani. A folyadékkristály molekulák erős kölcsönhatásba lépnek a mintatartó falával, ezért a mintatartóban csak olyan tartományok alakulnak ki, melyen belül a molekulák rendezettek. Polarizációs mikroszkóppal ezek a tartományok jól láthatók. A mintatartó falának megfelelő előkezelésével (l. IV. fejezet) makroszkópiusan is rendezett minta készíthető. Az anyagminta optikai tengelye a molekulák hossztengele irányában áll, üveglapok között ezt könnyű ellenőrizni. Nem átlátszó falú mintatartóban a rendezett mintát elektromos vagy mágneses térrel hozzuk létre. Mágneses tér a molekulák hossztengelejét a tér irányába állítja, elektromos térrel azonban többnyire csak pozitív dielektromos anizotrópiájú anyag rendezhető (l. IV. fejezet). Ezért vizsgálataimhoz az anyagokat a változó molekuláris szerkezet, a dielektromos anizotrópia előjele, az eredő dipólok iránya és a fellépő folyadékkristály-állapotok jellege szerint válogattam össze. A vizsgálatra kiszemelt anyagokat az I. táblázatban megadom.

Állapítsuk meg azokat a hőmérséklet-tartományokat, melyeknél az anyag különböző állapotba megy át!

2. Termikus tulajdonságok vizsgálata [6]

Az intézetünkben szintetizált anyagainkat először Perkin—Elmer DSC—2 párszázó kaloriméterrel vizsgáltuk meg. Megállapítottuk a fázisátmenetek hőmérsékletét, az átmenetek entalpiáját, a hőkezelések hatását.

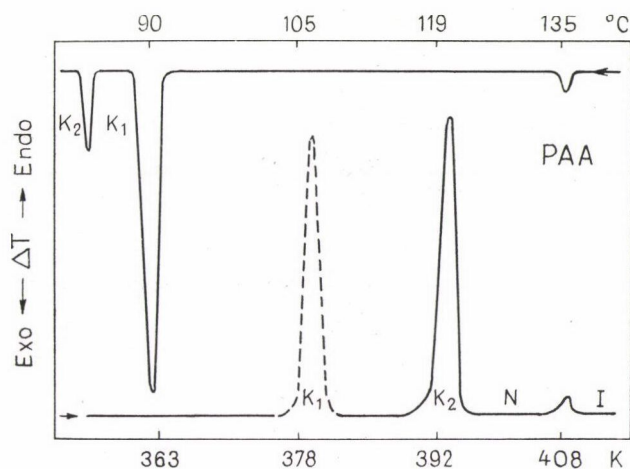
A kalibráló anyag indium, desztillált víz és tisztított ciklohexan volt. Az 1—3 mg-os anyagmintáinkat a berendezéshez kapható alumínium tartókba tettük. A kaloriméter érzékenysége 4—20 mJ/sec volt. A fűtés és hűtés sebességét a várható effektusok szerint változtattuk. A választott anyagok termogramja közül hármat az 1—3. ábrákon bemutatok. A hőmérséklet-változások irányát a görbéken elhelyezett nyilak jelzik.

PAA termogramja az 1. ábrán látható. Ebből megállapítható, hogy izotrop állapotból lehűtve 135 °C-on nematikus állapotba (jele $I \rightarrow N$), majd tovább hűtve először 90 °C-on K_1 szilárd, majd 86 °C-on K_2 szilárd módosulatba megy át. Újra fűtés során a K_2 módosulatból 119 °C-on olvad meg az anyag és nematikusává válik. A K_1 szilárd állapotot stabilizálni lehet úgy, hogy a K_1 fázis megjelenése után stabilizáljuk, illetve kis mértékben emeljük a hőmérsékletet. A tiszta K_1 állapotot 90—105 °C között ilyen stabilizálással ki tudtuk tenyészteni. A $K_1 \rightarrow N$ fázisátmenetet szaggatott vonallal rajzoltuk be. A K_1 állapotból 105 °C-on megy át az anyag nematikus állapotba. A nematikus állapot lassú hűtéssel túlhűthető, 86 °C-nál K_2 stabil állapotba megy át. Ez a stabil állapotú anyag 119 °C-on alakul át nematikusává. A kalori-

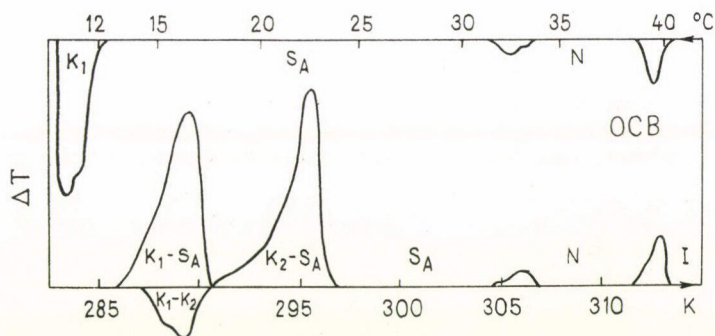
1. TÁBLÁZAT

Sor-szám	Anyag neve (angolul)	Molekula szerkezete és a dipólók helyzete	Dipól-momentumok Debye-ban*		Dipól szöge	
			Végek	Kapcsolók	Végek	Kapcsolók
1.	Para-azoxy -anizol PAA		1,28 1,28	1,7	72	70
2.	p-di-butyl-azoxy- benzoate DBAB		0	1,7	0	70
3.	P-methoxy-p'-n- butyl-azoxy- benzene MBAB		1,28 0	1,9	72	53
4.	p-methoxyben- zilidene-p'-n butylaniline MBBA		1,28 0	1,61	72	35
5.	di-butyl derivati- ve of phenyl- benzoyloxy benzoate DB-PBB		0 0	1,9 1,9		53 53
6.	di-chlorine deriva- tive of phenyl- benzoyloxy benzoate DCI-PBB		1,59 1,59	1,9 1,9	0 0	53 53
7.	cyano octyl-bi- phenyl COB		4,05 0	—	0	—
8.	nitrophenyl octy- loxy-benzoate NPDOB		4,01 1,3	1,9	0 71	53

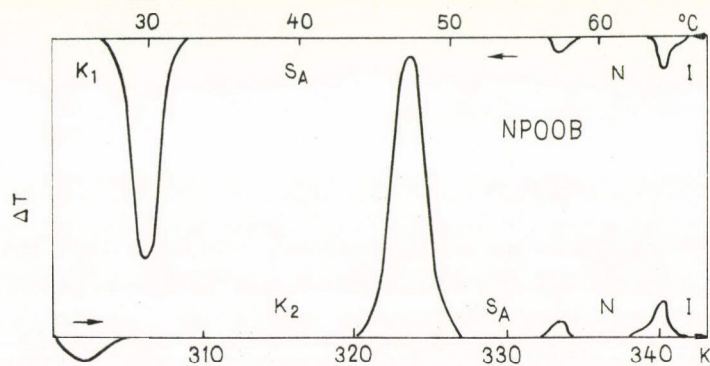
* 1 D = $3.33 \cdot 10^{-30}$ Cm



1. ábra. A PAA DSC-2 kaloriméterrel mért termogramja



2. ábra. Az OCB termogramja DSC-2 kaloriméterrel



3. ábra. Az NPOOB termogramja DSC-2 kaloriméterrel

2. TÁBLÁZAT

A fázisátmenetek sémái

Anyagok neve	Fázisátmenet sémája
PAA	
DBAB	
MBAB	
MBBA	
DB-PBB	
DC1-PBB	
OCB	
NPOOB	

III. TÁBLÁZAT

Anyag neve	T_{NA}/T_{NI}	$\Delta H \text{ kJ/mol}$			$\Delta S \text{ J/mol K}^{-1}$		
		K	$S_A - N$	$N - I$	K	$S_A - N$	$N - I$
PAA	—	29,58	—	0,59	75,31	—	1,42
DBAB	—	24,27	—	0,25	83,51	—	0,84
OCB	0,976	23,34	0,11	0,069	72,8	0,36	2,18
NPOOB	0,98	34,72	0,03	0,29	108,0	0,10	0,88
CBOOA	0,935	—	0,02	—	—	0,056	—

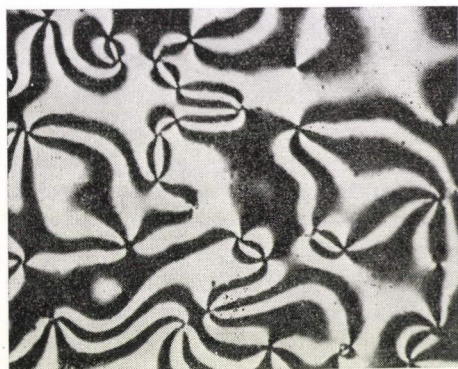
méterrel és polarizációs mikroszkóppal megállapított fázisátmenetek sémáit a II. táblázatban megadom. A hőmérséklet-változás irányát (fűtés, ill. hűtés) nyilak mutatják.

Az OCB, illetve NPOOB termogramját a 2., ill. 3. ábrán mutatom be. Ezeknél az anyagoknál jól látható, hogy a szmektikus-A szerkezet is fellép.

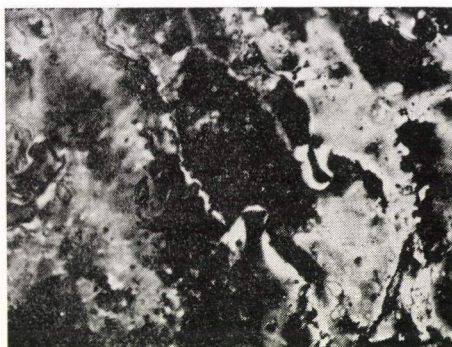
A kalorimetrikus mérésekből megállapítottam a fázisátmenetek entalpia és entrópia változását. Ezeket a III. táblázatban összefoglaltam. Különösen érdekes a S_A-N fázisátmenet, mert ez első vagy másodrendű is lehet.

3. Szerkezetek és texturák vizsgálata

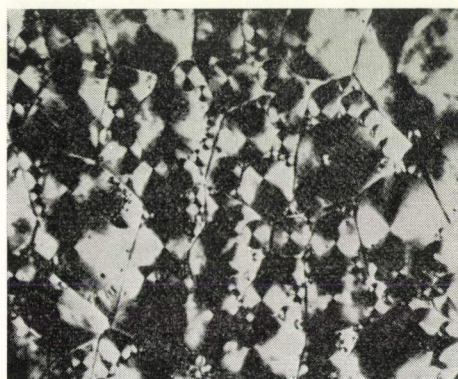
A kaloriméterrel végzett vizsgálatainkat [6] hűthető-fűthető mintatartóval rendelkező Zeiss Amplival polarizációs mikroszkóppal optikai mérésekkel is kiegészítettem, illetve a megfelelő állapotok texturáit is megvizsgáltam. A szmektikus-A és a nematikus állapotokban megfigyelt texturákat a 4. ábrán bemutatom.



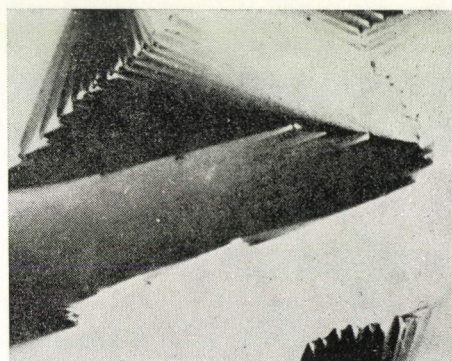
a) Nematikus (Schlieren) fonalas



b) Nematikus márvány



c) Szmektikus-A egyszerű poligon



d) Szmektikus-A egyszerű legyező

4. ábra. Nematikus és szmektikus-A szerkezetek polarizációs mikroszkópban láthatói képei

A különböző szilárd állapotokhoz is különböző texturák rendelkezhetők. A fázis-átalakulások hőmérsékletét a látómezőbe bevetített hőmérőről olvastam le. A többi anyagmintán végzett méréseinket már nem részletezem, a mérések eredményeit a II. táblázatban összefoglalom.

A PAA és a DBAB fázisátmereteinek vizsgálataiból azonnal megállapítható egyrészt, hogy a DBAB-ben több szilárd módosulat alakulhat ki, másrészt a kristályosodás sebessége lényegesen kisebb. Mi játszsa ebben a főszerepet? Az I. táblázatban megadtam a molekulán található dipólok nagyságát és a hosszteneggellyel bezárt szögüket, ezek után megállapíthattam, hogy:

- A szilárd állapot stabilabb (magasabb hőmérsékleten olvad az anyag), ha a molekula mindkét végén dipól van. Ha az egyik dipólt lecseréljük, az olvadáspont már lecsökken.
- Mindkét végén dipóllal rendelkező anyagban a kristályosodás sebessége nagy, amit egy butil csoporttal már lecsökkenthetünk.
- Az egyik dipólvég lecserélése növeli a metastabil állapotok számát.
- Lassan kristályosodó anyagoknál a gyors hűtés üvegállapotot hoz létre.
- Az irodalomban, táblázatokban található egyes adatok között eltérések azért is lehetnek, mert más-más metastabil állapotot vizsgálnak a mérések során.

Felvetődik a kérdés, milyen különböznek egymástól a stabil és metastabil anyagok? Ehhez először a metastabil anyagok szerkezetét kellene ismerni. Ezen a téren röntgendiffrakciós vizsgálatokat még nem végeztek. Deuterizált PAA-on neutron-diffrakciós vizsgálattal mi próbáltuk eldönteni, hogy a különböző K_1 és K_2 állapothoz különböző szerkezet tartozik-e [7]. Ezeket a méréseket intézetünk neutronspektroszkópiai csoportja háromtengelyű diffraktométeren végezte el 0,15 és 0,29 nm monokromatikus neutronnyalábbal, mellyel a reflektáló síkok távolsága 0,2—2 nm között mérhető. A mérések során kapott diffrakciós görbéket az 5.b. és c. ábrán mutatom be. Összehasonlítás kedvéért az 5.a. ábrán *Kirghbaum* [Kr70] által egykristály mintán végzett röntgendiffrakciós méréseket is feltüntettem, mely alapján a monoklin cella rácsparamétereire: $a=1,5776$ nm; $b=0,8112$ nm; $c=1,1018$ nm és $\beta=114,57^\circ$ értékek adódtak. Az általunk jó túlűtűssel (103—107 °C) mért alsó b. görbe csúcsai a röntgendiffrakciós csúcsokkal jól egyeznek. Ebben a szerkezetben a molekula *Krigbaum* szerint transzkonformációban van. Sematikusan ezt a 6.a. ábrán mutatom be.

A 0,1946 nm-nél fellépő magas csúcs a benzolgyűrűkön létrejövő reflexió eredménye. Határozottan látható, hogy a felső görbén ez a csúcs nem jelenik meg, hanem helyette 18,8 nm⁻¹ és 17,1 nm⁻¹-nél két csúcs lép fel, ami magyarázható a rács kismértékű torzulásával. A molekula tengelyek „c” irányú kismértékű átalakulása a végek helyének változatlan tartásával úgy magyarázható, hogy az egyes molekulák transzhelyzetből ciszhelyzetbe ugranak át (6.b. ábra). Ha feltételezzük, hogy csak minden második molekula vége fordul át (6.c. ábra), akkor az előbbivel szemben kettőzött távolságú reflexió jön létre. (5.c. ábra), vagyis a

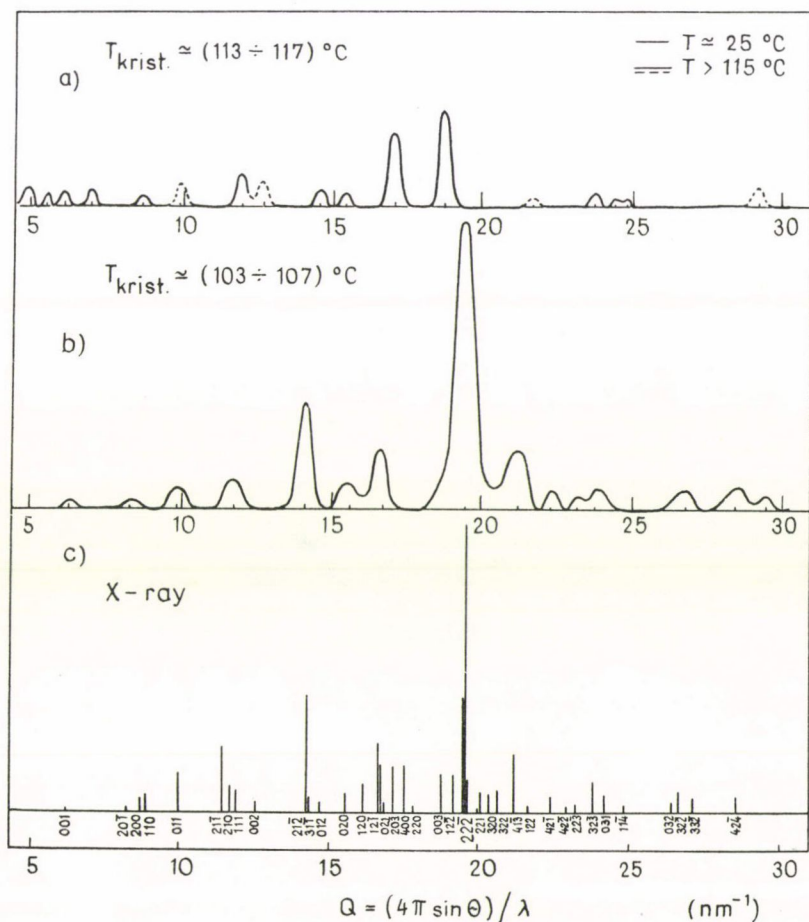
stabil fázis síkjain a reflexió,	a kettős távolságú reflexió
(222) 19,46 nm ⁻¹	9,8 nm ⁻¹
(212) 14,14 nm ⁻¹	7,07 nm ⁻¹
(211) 11,5 nm ⁻¹	5,8 nm ⁻¹
(011) 9,9 nm ⁻¹	4,9 nm ⁻¹

momentumváltozásoknál lép fel.

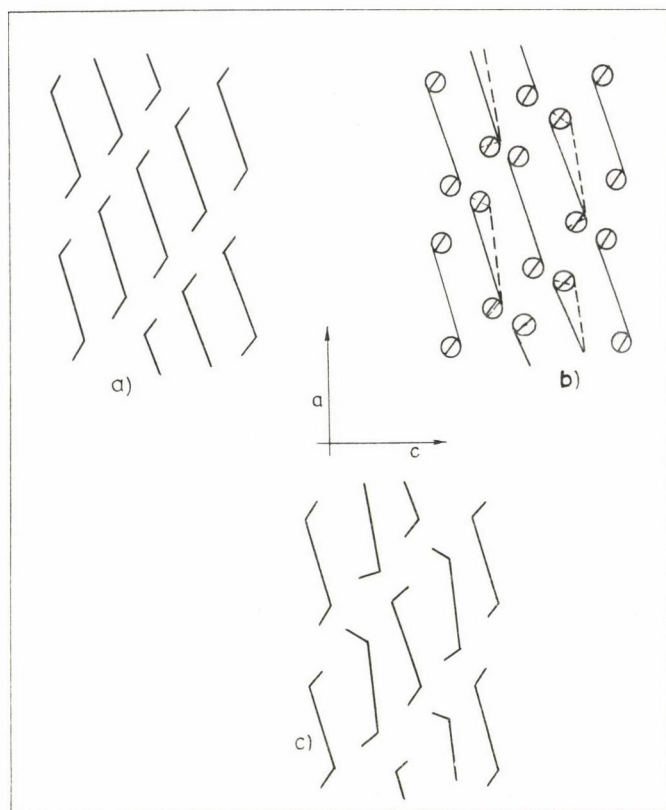
Ezzel értelmezni lehet a fenti diffrakciós képet, továbbá, hogy a rácsállandó $c=2,19$ nm lesz, ahogy ezt Krigbaummal szemben Würstlin [Wü74] állította.

Ez a mérés természetesen nem bizonyítja azt, hogy metastabil állapot szerkezete valóban megegyezik az itt javasolttal, — ehhez egykristályon kellene diffrakciómérést végezni, de azt igen, hogy a két szerkezet különböző és létrejöttektől a molekulák mozgásának a mezofázisában, amelytől ezek kialakulnak, döntő szerepe lehet. Az itt felvetett kérdések alapján a molekula végeinek mozgását NMR-módszerrel Pócsik I. [Po77] vizsgálta.

A mezofázisból létrehozható szilárd állapotokról még nagyon keveset tudunk. Azt sem ismerjük, hogy a molekula, illetve egyes részei a szilárd-, illetve mezofázisban milyen mozgásokat végeznek. PAA esetét tekinthetjük csupán példának, mert



5. ábra. Különböző szilárd módosulatokon mért neutron (b, c) és röntgen (a) diffrakciós intenzitások



6. ábra. A molekulák lehetséges elhelyezkedése a kristályrács a-c síkjában.

a) A molekulák transz-konformációja a stabil szerkezetben; b) Egyes molekulák transz-konformációból cisz-be mennek át a végek helyének változása nélkül; c) A molekulák kevert, de periódikus elhelyezkedése.

a II. táblázatban található többi anyagnál minden bizonnyal hasonlóképpen állapíthatók meg. Az eddig elmondottak alapján folyadékkristály és szilárdtest polimorfia szempontjából érzékelhetjük már a szerkezeti és a molekula dinamikai vizsgálatok jelentőségét.

II. AZ IRÁNYRENDEZETTSÉG ÉS A DIELEKTROMOS ANIZOTRÓPIA

1. Elméleti alapok

Homogén nematikus anyag dielektromos tulajdonságai az egytengelyű kristálykéhez hasonló. A dielektromos tenzor komponensei

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{\parallel}, \quad \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{\perp}, \quad (1)$$

ahol ε_{\parallel} a direktor irányában, ε_{\perp} a rá merőleges irányba mért dielektromos állandó. Elektromos térben való viselkedést elsődlegesen meghatározó paraméter a dielektromos anizotrópia:

$$\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp} \quad (2)$$

értéke és előjele. ε_{\parallel} -t, illetve ε_{\perp} -t a molekula α polarizálhatósága mellett a molekulán elhelyezkedő μ_i dipólok nagysága és rendezettsége határozzák meg. Yin [Yi74] számítása szerint a statikus dielektromos állandók

$$\frac{\varepsilon_{\parallel} - 1}{4\pi} = N_0 HF \left\{ \left[\bar{\alpha} + \frac{2}{3} \Delta\alpha S_{\theta} \right] + \frac{F}{3kT} [(1+2S_{\theta})(1+R_{\parallel})\mu_{\parallel}^2 + (1-S_{\theta})(1+R_{\perp})\mu_{\perp}^2] \right\} \quad (3a)$$

ill.

$$\frac{\varepsilon_{\perp} - 1}{4\pi} = N_0 HF \left\{ \left[\bar{\alpha} - \frac{1}{3} \Delta\alpha S_{\theta} \right] + \frac{F}{3kT} \left[(1-S_{\theta})(1+R_{\parallel})\mu_{\parallel}^2 + \frac{1+S_{\theta}}{2}(1+R_{\perp})\mu_{\perp}^2 \right] \right\} \quad (3b)$$

összefüggésekkel adható meg, ahol μ_{\parallel} , illetve μ_{\perp} a molekula dipólmomentumának a hossztengety irányába eső, illetve a rá merőleges irányokba eső komponense.

$$S_{\theta} = \left\langle \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right\rangle \quad (4)$$

a hosszú távú orientációs rendparaméter. θ a kiszemelt molekula hossztengetye és a direktor által bezárt szög. $\langle \rangle$ a termikus átlagolást jelöli. $R_{\parallel} = R_{\parallel}(\mu_i, \mu_j, S_{\theta}, T)$, illetve $R_{\perp} = R_{\perp}(\mu_i, \mu_j, S_{\theta}, T)$ a közeli rendparaméterek, melyek azt adják meg, hogy a molekula rövid, illetve hossztengetye mennyire végez szabad mozgást. α_{\parallel} , ill. α_{\perp} a molekula indukált polarizálhatósága a hossztengety, illetve rá merőleges irányban. Továbbá

$$\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}, \quad \bar{\alpha} = \frac{2\alpha_{\perp} + \alpha_{\parallel}}{3} \quad (5)$$

$$f = \frac{4\pi}{3} N_0 \frac{2\bar{\varepsilon} - 2}{2\bar{\varepsilon} - 1}, \quad F = \frac{1}{1 - f\bar{\alpha}}, \quad H = \frac{3\bar{\varepsilon}}{2\bar{\varepsilon} + 1} \quad (6)$$

A dielektromos anizotrópia nematikus anyagoknál

$$\varepsilon_a = 4\pi N_0 HF \left\{ \Delta\alpha S_{\theta} + \frac{F}{3kT} \left[3S_{\theta} \mu_{\parallel}^2 (1+R_{\parallel}) + \frac{1}{2} (1-3S_{\theta})(1+R_{\perp}) \mu_{\perp}^2 \right] \right\} \quad (7)$$

összefüggéssel számolható.

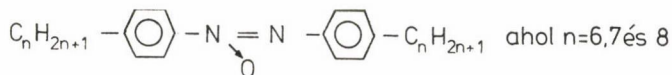
Az átlagos dielektromos állandó

$$\bar{\varepsilon} = \frac{2\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_{\parallel}}{3} = N_0 HF \left\{ \bar{\alpha} + \frac{F}{3kT} \left[\mu_{\parallel}^2 + \frac{2}{3} \mu_{\perp}^2 + R_{\parallel} \mu_{\parallel}^2 + \frac{2}{3} R_{\perp} \mu_{\perp}^2 \right] \right\}. \quad (8)$$

Itt N_0 az egységnyi térfogatban levő molekulák számát jelöli. A (7) formula alapján megállapíthatjuk, hogy nematikus anyagoknál, ha $\mu_{\parallel} \gg \mu_{\perp}$, a dielektromos anizotrópia a S_{θ} rendparaméterrel arányos. A szmektikus-A anyagok dielektromos

állandóinak leírására hasonló pontosságú formulákat még nem ismerünk, pedig a dielektromos állandók változásának kérdése a fázisátmenetek során izgalmasnak tűnő kérdés.

De Jeu és társai [Je74] néhány



anyag vizsgálata során azt tapasztalták, hogy a fázisátmenet környezetében a dielektromos anizotrópia előjelet vált. Ennek magyarázatára olyan forgási ellipszoid alakú molekulákat felvéve, melyek hossztengele 2c, rövid tengelye 2r, csak dipól-dipól kölcsönhatást feltételezve, tökéletes irányrendezettség mellett ($S_\theta=1$) megkicsültek egy kiszemelt molekulára jutó $\bar{\mu}$ effektív dipólmomentum komponenseit és nematikus anyagokra

$$\bar{\mu}_{\parallel}(N) \approx \mu_{\parallel} \left[1 - \frac{\mu_{\parallel}^2}{kT} \frac{1}{cr^2} \right] \quad (9)$$

$$\bar{\mu}_{\perp}(N) \approx \mu_{\perp} \left[1 + \frac{\mu_{\perp}^2}{kT} \frac{0,3}{cr^2} \right]$$

szmeztikus-A anyagokra

$$\bar{\mu}_{\parallel}(S_A) \approx \mu_{\parallel} \left[1 - \frac{2\mu_{\parallel}^2}{kT} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{cr^2} \right) \right] \quad (10)$$

$$\mu_{\perp}(S_A) \approx \mu_{\perp} \left[1 + \frac{\mu_{\perp}^2}{kT} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{1}{cr^2} \right) \right]$$

kifejezéseket kapták. Feltételezték azt is, hogy S_A állapotban a molekulák tömegközéppontjai pontosan a $z=z_k = \pm k2c$ síkokban, de azon belül izotropan helyezkednek el. Itt k egész számokat jelöl. Az általuk vizsgált anyagoknál, ahol $\mu_{\parallel} \approx \mu_{\perp}$ volt, ezekkel a formulákkal kvalitatív egyezést kaptak. Különösen érdekesnek tűnik a jelenség megvizsgálása olyan anyagoknál, melyeknél csak egy dipólmomentum van és az a hossztengele irányába mutat. Ilyen anyag az OCB. Az NPOOB-nél is a hossztengele irányába mutat az eredő dipól és csak kis merőleges komponense van.

2. Kísérleti vizsgálatok és következtetések

A dielektromos tulajdonságok vizsgálatára osztályunkon mérőterendezést hoztunk létre, mely 1,7 T-ig változtatható terű elektromágnesből, megfelelő mérőhidakból és hűthető-fűthető mérőcellából állt.

Az elektromágnes légrése változtatható, de általában 8 cm, a poák átmérője 10 cm. A mérések során a molekulák rendezésére 0,7–1 T mágneses tér mindig elegendőnek bizonyult.

A dielektromos állandók frekvenciafüggését az 50 Hz–100 kHz frekvenciatartományban Gereral Radio 1615A, 100 kHz–10 MHz frekvenciatartományban Wayne Kerr B602 típusú mérőhidakkal mértük ki. A mérőhidak elektromos jele

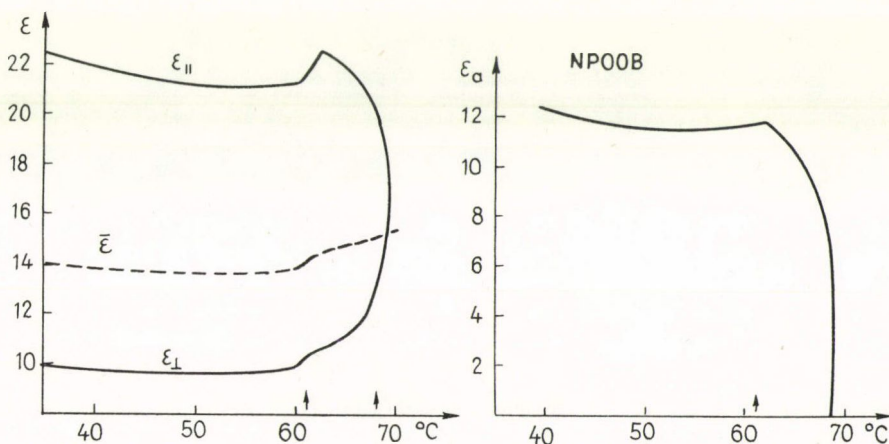
mindig kisebb volt 20 V-nál, melynek a molekulák makroszkopikus orientáltságát zavaró hatása elhanyagolható a mágneses téréhez képest.

A folyadékkristály anyagot vákuumba lezárható üvegampullába forrasztott, két egymással párhuzamosan elhelyezkedő tantál lapocskából álló síkkondenzátor közé öntöttük. Ezt a mintatartót folyadékkal fűthető-hűthető tartóba tettük, mely a minta hőmérsékletét $0,1^\circ\text{C}$ -ra stabilizálta. Az elektródák felülete 1 cm^2 , távolságuk $0,5\text{ mm}$. A mérőcella a mágnes póói között függőleges tengely körül elforgatható, így az elektródákra kapcsolt elektromos tér iránya a mágneses tér irányával párhuzamosra (ϵ_{\parallel} mérés) és merőlegesre (ϵ_{\perp} mérésre) állítható t.e.

A mintából a levegőt többszörös melegítéssel kibuborékolattuk, majd lefagyasztottuk és 10^{-2} Hgmm nyomásra leszívtuk. A tantál elektródák és a wolfram-ból készült kivezetések, továbbá a cella lezárása megfelelően ellenállóknak bizonyultak ahhoz, hogy a folyadékkristály anyagok elszennyeződését megakadályozzák. Az elkészített mintán a mérések hónapok múlva is reprodukálhatók voltak. A dielektromos anizotrópia méréseink közül itt csak az OCB-n és a NPOOB-n kapott adatainkat analizáljuk [8]. A mért dielektromos állandókat és anizotrópiákat a 7. és 8. ábrákon mutatom be. E mérések alapján új megállapításokat tehetünk:

— A $S_A \rightarrow N$ fázisátmenet során mindkét anyagnál mindkét dielektromos állandó értéke ugrásszerűen megváltozik a fázisátmenet során.

— ϵ_{\parallel} és ϵ_{\perp} is mindkét anyagnál nematikus állapotban nagyobb, mint szmektikus-A állapotban. Ez a megfigyelés azért is érdekes, mert egyrészt de Jeu és társai az említett anyagoknál azt tapasztalták, hogy ϵ_{\perp} a hőmérséklettel monoton csökken (tehát S_A állapotban volt nagyobb), másrészt a megfigyelt változás nem magyarázható hosszú távú irányrendezettség megnövekedésével, ugyanis az mind elméletileg [Mc71], mind kísérletileg bizonyított, hogy S_0 szmektikus-A állapotban a fázisátmenet jellegének megfelelő mértékben szmektikus állapotban nagyobb, mint nematikusban.

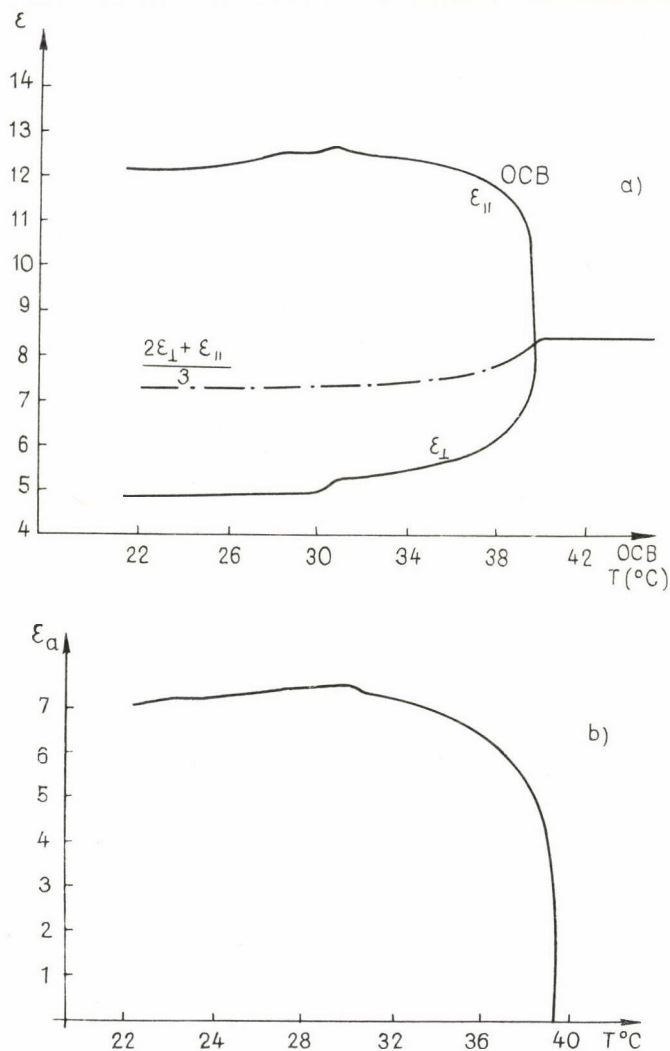


7. ábra. Az NPOOB statikus dielektromos állandóinak ϵ_{\parallel} , ϵ_{\perp} és $\bar{\epsilon}$, valamint dielektromos anizotrópiájának ϵ_a hőmérsékletfüggése. Nyilak a fázisátmenetek hőmérsékleteit jelölik.

Az ε_{\parallel} megnövekedését nematikus állapotban a (9) és (10) formulák alapján megérthetjük, ugyanis

$$\bar{\mu}_{\parallel}(N) - \bar{\mu}_{\parallel}(S_A) \approx \frac{\mu_{\parallel}^3}{kT} \left(\frac{2}{r^3} - \frac{3}{cr^2} \right) > 0, \quad (11)$$

mert esetünkben $c \approx 4r$. Ebből fizikailag az következik, hogy szmektikus síkokban a molekulák nematikus helyzetükhöz viszonyítva növekvő számban antiparalel igyekeznek beállni. A növekvő antiparalel beállás miatt az effektív dipólmomentum



8. ábra. Az OCB statikus dielektromos állandóinak (a) és a dielektromos anizotrópiájának (b) hőmérsékletfüggése

S_A állapotban kisebb, mint nematikusban. A molekulapárok dipóljának növekvő számú antiparalel beállásával magyarázta Chandrasekhar [Ch77] azt, hogy ε nematikus állapotból izotrop állapotba extrapolált értéke kisebb, mint amit izotrop állapotban mérünk. Ez a jelenség az általunk vizsgált mindkét anyagnál megfigyelhető. Innen adódik az a következtetés, hogy a folyadékkristályok molekuláinak hossz-tengelye irányába mutató dipólmomentum komponensei növekvő számmal állnak be antiparalel párokba, ahogy izotrop állapotból nematikusba, majd nematikusból szmektikus állapotba megyünk át.

A dipólmomentumok merőleges komponenseinek változását de Jeu-ék által bevezetett formulákkal:

$$\bar{\mu}_{\perp}(N) - \bar{\mu}_{\perp}(S_A) \approx \frac{\mu_{\perp}^3}{kT} \left(\frac{1,3}{cr^2} - \frac{1}{r^3} \right) \quad (12)$$

ami $c \approx 4r$ esetében negatív, nem érthetjük meg, mert ezzel a becsléssel szemben mérésünk alapján $\varepsilon_{\perp}(N) - \varepsilon_{\perp}(S_A) > 0$. Ez azt jelenti, hogy olyan anyagoknál, melyeknél $\mu_{\parallel} \gg \mu_{\perp}$, az ε_{\perp} -ben a (3b) formulához hasonlóan μ_{\parallel} járuléka szmektikus szerkezetben is döntő lehet. Minderesetre látszik, hogy a dielektromos állandók hőmérséklet-változásának leírására az eddig ismertnél pontosabb formula kívántatik. Nem beszéltünk még a dielektromos anizotrópia vonatkozásában két érdekes megfigyelésről:

— Míg a (7) formula és a méréseink alapján nematikus állapotban a dielektromos anizotrópia $\mu_{\parallel} > \mu_{\perp}$ esetében arányos a S_0 rendparaméterrel, addig szmektikus-A állapotban nem lehet arányos vele.

— A vizsgált két anyagunknál a dielektromos anizotrópia S_A állapotból nematikus felé haladva kismértékben megnövekszik. Ezt a jelenséget valószínűleg a közeli rend növekedésével értelmezhetjük a fázisátmenethez közeledve. A fázisátmenet jellegét a III. 1.2.3 pontban vizsgáljuk.

3. A termikus és a dielektromos vizsgálatok kapcsolata a gyakorlati alkalmazásokhoz

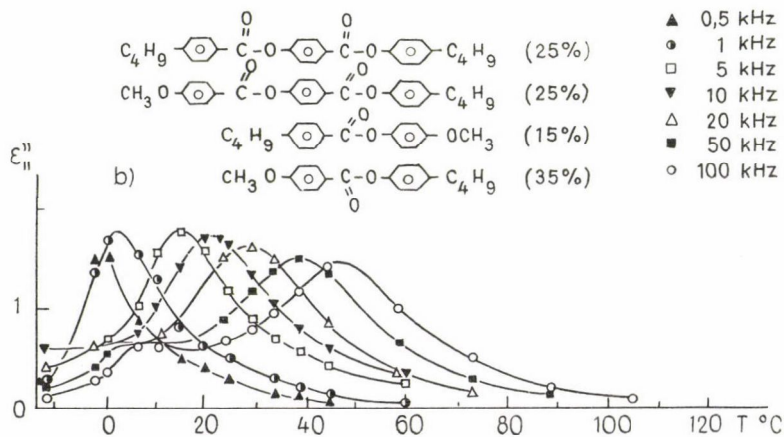
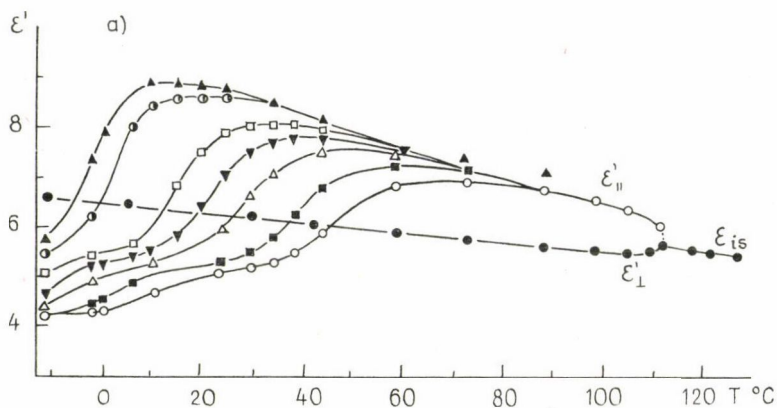
A gyakorlati alkalmazások során mindig egy kívánt hőmérséklet-intervallumban megfelelő előjelű dielektromos anizotrópiájú anyagra van szükség (l. IV. fejezetet). A kívánt hőmérséklet-tartományban nematikus anyag többnyire eutektikus keverék. A keverék komponenseinek termodinamikai adataiból az előállított anyag nematikus tartományának hőmérséklet-határai ugyan megtecsülhetők, de az itt ismertetett módszerekkel azt mindig ellenőrizzük.

Az észter alapú anyagok fehérek és a kémiai, valamint sugár stabilitásuk megfelelőnek bizonyultak, ezért nemzetközileg nagy reményeket fűztek a kijelzőkben való felhasználásukhoz. Négy anyag keverékéből -43°C -tól 100°C -ig nematikus keveréket lehet előállítani. A keverék összetételét a IV. táblázatban megadjuk.

Megvizsgáltuk ennek a keveréknek a dielektromos tulajdonságait a hőmérséklet és a frekvencia függvényében. Mértük a dielektromos állandók ε' reális és az ε'' imaginárius részének hőmérséklet-függését különböző frekvenciákon. A mérések során kapott adatokat a 9. ábrán mutatjuk be. Láthatjuk, hogy a frekvenciától függően különböző hőmérsékleten lesz ε_{\parallel} nagyobb, mint ε_{\perp} , azaz a dielektromos

IV. TÁBLÁZAT

$\text{C}_4\text{H}_9-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_4\text{H}_9$	(25)	súly %
$\text{CH}_3\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_4\text{H}_9$	(25)	
$\text{C}_4\text{H}_9-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{O}-\text{CH}_3$	(15)	
$\text{CH}_3\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}(=\text{O})-\text{O}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{C}_4\text{H}_9$	(35)	



9. ábra. A négyes észter keveréken rögzített frekvenciákon mért dielektromos állandók reális ϵ' és imaginárius ϵ'' részének hőmérsékletfüggése

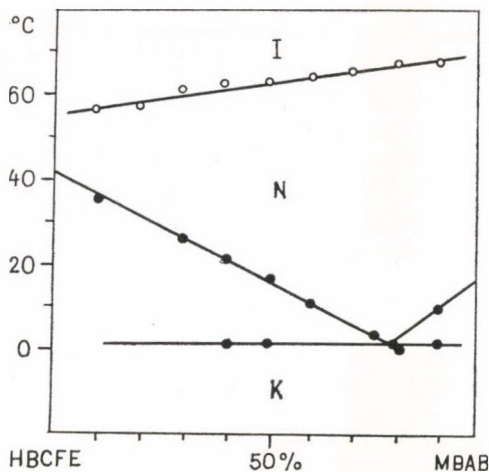
anizotrópia bizonyos esetekben előjelet vált. A kijelzők működését ez a jelenség alapvetően befolyásolja, ezért erre figyelni kell. A másik tapasztalat ezzel a keveréssel kapcsolatban az volt, hogy hosszú idejű állás után üvegesedni kezd. Ez a jelenség ugyan nem zárja ki a kijelzőtén való felhasználását, mert kis melegítés után ismét használható lesz, de megnehezíti azt.

Megvizsgáltam ezután a p-heptil benzoészav-p'-ciáno fenilészter és az MBBA fázisdiagramját. A mérések eredményét a 10. ábrán bemutatom.

A 10. ábrából leolvasható, hogy az eutektikus keverék 3 °C-tól 68 °C-ig nematikus. A méréseim azt mutatták, hogy ez az anyag -26 °C-ig túlűthető. Ismét láthatjuk, hogy a túlűtött állapotok felhasználhatóságának megoldása milyen fontos gyakorlati kérdés. A feladat megoldása valószínűleg kapcsolatban van a metastabil szerkezetek kialakulásával, aminek megismerése még további kutatásokat kíván.

Az itt bemutatott anyag pozitív dielektromos anizotrópiájú, megfelelően stabilnak bizonyult, ezért kijelzőkbe beépítettük. Kijelzőkben mindmáig kifogástalanul működik.

A dielektromos anizotrópia előjelváltása bizonyos frekvenciáknál molekuladynamikai kérdésekkel függ össze, ezzel a következő fejezetben foglalkozunk.



10. ábra. A HBCFE és az MBBA fázisdiagramja

III. MOLEKULA DINAMIKAI VIZSGÁLATOK

Kondenzált rendszereken a molekulák dinamikai vizsgálatára számos módszert NMR, rugalmatlan neutronszórás, dielektromos relaxáció stb. fejlesztettek ki. Ezeket a módszereket folyadékkristályok vizsgálatára is felhasználhatjuk. Figyelmet természetesen itt a folyadékkristály-állapot legjellemzőbb sajátága

— az irányrendezettséggel összefüggő legsajátosabb mozgásokra kell összpontosítanunk.

Nematikus és szmektikus-A anyagok egytengelyűek és hengerszimmetrikusak, így bennük a legsajátosabb mozgásnak, a molekula hossztenegelyének a direktorhoz viszonyított elfordulása és a direktor körül végzett forgása tekinthető. Izotrop állapotban a direktorhoz viszonyított mozgások eltűnnek.

A dielektromos relaxációs mérések lehetőséget nyújtanak arra, hogy a direktorhoz viszonyított elfordulást, a rövid tengely körüli forgást, dipólok mozgását vizsgáljuk.

Rugalmatlan neutronszórás-mérések a molekula, illetve annak egyes részeinek mozgásáról eléggé teljes képet adnak, ezzel azonban a mérések kiértékelése is bonyolultabbá válik. A különböző vizsgálati módszerek részben átfedik, részben kiegészí-

tik egymást. Itt a dielektromos relaxáció és rugalmatlan neutronszórás segítségével kapott eredményeimet mutatom be. A többi vizsgálati módszer eredményeire csak akkor hivatkozom, ha az itt bemutatott mérési eredmények interpretálásához szükségesek.

1. Dielektromos relaxációs vizsgálatok

1.1. Elméleti alapok

Az $\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$ komplex dielektromos állandó, a dipól-dipól és az indukált dipól-dipól kölcsönhatások figyelembevételével Cole [Co65] szerint a

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = \frac{1}{1 + A \left[\frac{1}{\mathcal{F}\{-\dot{\varrho}(t)\}} - 1 \right]} \quad (13)$$

kifejezéssel adható meg. ε_0 és ε_∞ a nulla és a végtelen határfrekvencián vett értékeket jelöli. A kiválasztott dipólra a környezet hatását (valamely, pl. Onsager-modell alapján) az A paraméterrel vesszük számításba. Ez a paraméter a molekuláris relaxációs időt és a mért relaxációs időt kapcsolja össze. Debye szerint

$$A = \frac{\varepsilon_0 + 2}{\varepsilon_\infty + 2}. \quad (14)$$

Más kifejezések [Hi69] is ismertek, de ezek nem nagyon különböznek egymástól.

Itt $\mathcal{F}\{-\dot{\varrho}(t)\} = 1 - i\omega \int_0^\infty \varrho(t) e^{-i\omega t} dt$.

Ha a dipólmomentum korrelációs függvénye

$$\varrho(t) = e^{-t/\tau'} \quad (15)$$

függvénnyel írható le, akkor

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = \frac{1}{1 + i\omega\tau}, \quad \tau = A\tau' \quad (16)$$

kifejezést kapjuk, melyből a dielektromos állandó reális és imaginárius részére

$$\varepsilon' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau_\parallel^2}; \quad \varepsilon'' = (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \frac{\omega\tau_\parallel}{1 + \omega^2\tau_\parallel^2} \quad (17)$$

kifejezések adódnak. A dielektromos állandók reális és imaginárius részének frekvencia és hőmérsékletfüggését a 9. ábrákon mutattam be. Ha az $\omega\tau_\parallel$ kifejezést az egyik egyenletből a másikba helyettesítjük

$$\left(\varepsilon'(\omega) - \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_\infty}{2} \right)^2 + \varepsilon''(\omega) = \left(\frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{2} \right)^2 \quad (18)$$

összefüggésre jutunk, ami egy $\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty$ sugarú és $\left\{ \frac{\varepsilon_0 + \varepsilon_\infty}{2}, 0 \right\}$ középpontú félkör

egyenlete, az ε'' , ε' koordinátarendszerben. Ha a dielektromos állandó imaginárius részét a reális része függvényétén ábrázoljuk — ez a Cole-Cole ábrázolás — és félkört kapunk, amelynek középpontja az ε' tengelyen van, akkor azt mondjuk, hogy a folyamat egy relaxációs idővel jellemezhető. Ha két, egymástól eléggé különböző relaxációs idő jellemzi a relaxációs folyamatot, akkor

$$\frac{\varepsilon'(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = \frac{c_1}{1 + (\omega\tau_1)^2} + \frac{c_2}{1 + (\omega\tau_2)^2} \quad (19)$$

$$\frac{\varepsilon''}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = c_1 \frac{\omega\tau_1}{1 + (\omega\tau_1)^2} - c_2 \frac{\omega\tau_2}{1 + (\omega\tau_2)^2}$$

egymástól szétválasztható Cole-Cole görbékét kapunk, ahol

$$c_1/c_2 = \frac{\mu_1^2}{\mu_2^2} \quad (20)$$

és μ_1 , ill. μ_2 a rendszerben előforduló két független elektromos dipólus momentuma.

Ha a molekuláris mozgások következtében a relaxációs jelenségek folytonosan átfedik egymást, akkor a

$$\frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = \int_0^\infty \frac{f(\tau) d\tau}{1 + i\omega\tau} \quad (21)$$

általános összefüggést szokás használni, ahol $f(\tau)$ a relaxációs idők eloszlásfüggvénye.

Abban az esetben, amikor a relaxációs folyamatok egy szimmetrikus eloszlásfüggvénnyel jellemezhetők, akkor a Cole-Cole görbe középpontja az ε' tengely alá esik és a (16) kifejezés

$$\frac{\varepsilon^*(\omega) - \varepsilon_\infty}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty} = \frac{1}{1 + (i\omega\tau_p)^{1-h}}, \quad 0 < h < 1 \quad (22)$$

alakra módosul. A Cole-Cole ábrázolásban a kör középpontjának koordinátái $\left\{ \frac{1}{2}(\varepsilon_0 + \varepsilon_\infty), -\frac{1}{2}(\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty) \operatorname{tg} \pi h/2 \right\}$ és a relaxációs idők eloszlásfüggvénye

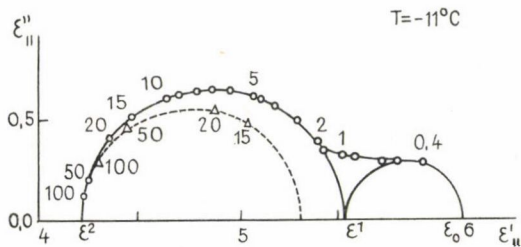
$$f(\tau) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\tau} \frac{\sin h\pi}{\operatorname{ch} [(1-h) \ln (\tau/\tau_p)] - \cos h\pi} \quad (23)$$

analitikus alakkal adható meg. τ_p a legvalószínűbb relaxációs idő, h az eloszlásfüggvény szélességére jellemző állandó.

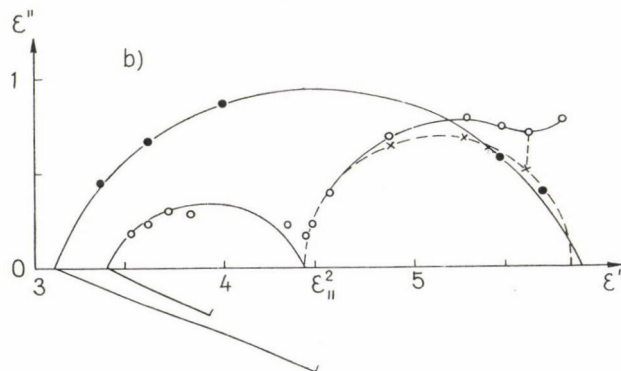
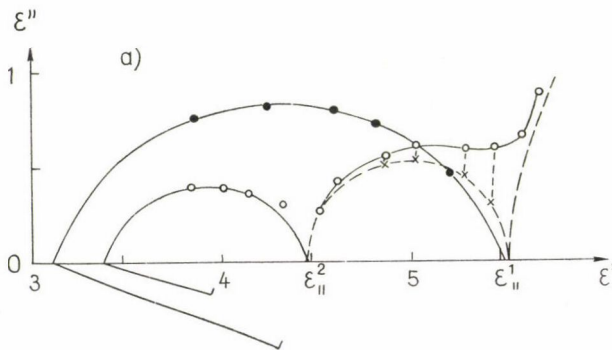
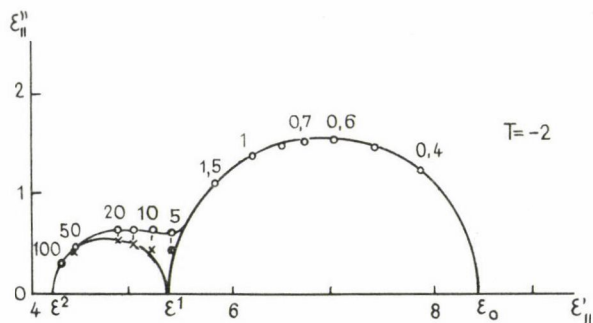
1.2. Kísérleti vizsgálatok

1.2.1. Keverék vizsgálata [9], [10]

Az I. 3. pontban ismertetett mérőberendezésekkel mértük a ε_{\parallel} és ε_{\perp} dielektromos állandók reális és imaginárius részének a frekvencia és hőmérsékletfüggését. A mérési eredményeket a 9. ábrán már bemutattam. A mérési adatok alapján fel-



11. ábra. Az $\varepsilon_{||}$ dielektromos állandó diszperziójának Cole-Cole ábrája. $\circ \circ \circ$ a mérési pontok, $\times \times \times$ és $\triangle \triangle \triangle$ az egymást részben átfedő két relaxációs folyamat szétválasztásával nyert adatok. ε_0 és ε^1 , ε^2 a két folyamat extrapolált dielektromos állandói. Görbéken a számok a mérés során használt frekvenciákat mutatják kHz-ben.



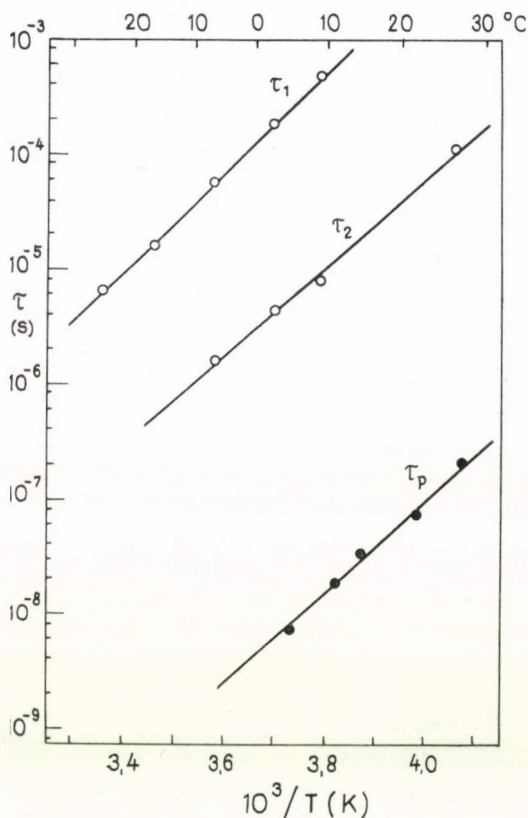
12. ábra. A komplex dielektromos állandók Cole-Cole ábrázolása. Pontok a merőleges, karikák a párhuzamos komponensen mért adatokat mutatják. A használt frekvencia itt 20 MHz-ig terjedt. Ahol a kör sugara nem esik a tengelyre, ott berajzoltam. a). $(\varepsilon_{||}$ és ε_{\perp} diszperziója $-9,2$ illetve $-11,1$ °C-on; b). $\varepsilon_{||}$ és ε_{\perp} diszperziója -27 illetve $-27,6$ °C-on.

rajzoltam a Cole-Cole görbéket is, melyek közül itt néhányat a 11. és 12. ábrákon bemutatok. A mérési pontok fölé írt számok azt a frekvenciát adják meg, melynél az illető pontokat mértük.

A 11. ábrán látható Cole-Cole görbékből megállapítható, hogy itt teljesül a (19) formulával adott eset, amikor két szétválasztható relaxációs idő jellemzi a folyamatot. A körök középpontjai az ϵ' tengelyen vannak. A 12. ábrán ez a helyzet már nem valósul meg ilyen tisztán. Mind a nagyfrekvenciás paralel (balra az első kör), mind a merőleges (pontokkal jelölt kör) dielektromos állandókhoz tartozó folyamatokat egymástól szétválasztható legvalószínűbb relaxációs idők jellemzik és a (23) formulával adott eloszlásfüggvény adja meg a lehetséges relaxációs időket.

Legkisebb négyzetek módszerével mindig meghatároztam a ϵ_0 , ϵ_∞ , h és $\tau_{||}$, ill. τ_p paramétereket. A keverékeken mért dielektromos relaxációs időket a hőmérséklet reciprokának függvényében a 13. ábrán mutatom. Láthatjuk, hogy a relaxációs idők a hőmérséklettől exponenciális törvény szerint függenek, melyekből a $\tau \sim e^{-W/kT}$ függvény alapján meghatározhatjuk a W aktiválási energiákat. Ezekből megállapíthatjuk, hogy a leghosszabb relaxációs idejű folyamathoz $W_1 = (84 \pm 2)$ kJ/mol, a kisebbhez $W_2 = (72 \pm 2)$ kJ/mol, míg a merőleges komponenshez $W = 70$ kJ/mol aktiválási energiák tartoznak. Mi tapasztaltuk először, hogy egy keverékben a relaxációs folyamatok a (19) formulával jellemezhető módon szétválhatnak. A jelenséget azzal magyaráztuk, hogy a keverékben lényegében véve két molekula típus (I. IV. táblázat), két és három benzolgyűrűs molekulák találhatók. Az egyik relaxációs folyamat a két, a másik a három benzolgyűrűs molekulákhoz rendelhető.

Ezekután nyilvánvaló, hogy egykomponensű anyagokon is kell méréseket végeznünk mind az itt tapasztalt effektus értelmezése, mind a további keverékek előállítására szempontjából. A keverékünkben szereplő két benzolgyűrűs anyagok monotrópak, azaz csak hűtésben mutatják a folyadékkristály-állapotot, ezért a mérések rajtuk kényelmetlenek.

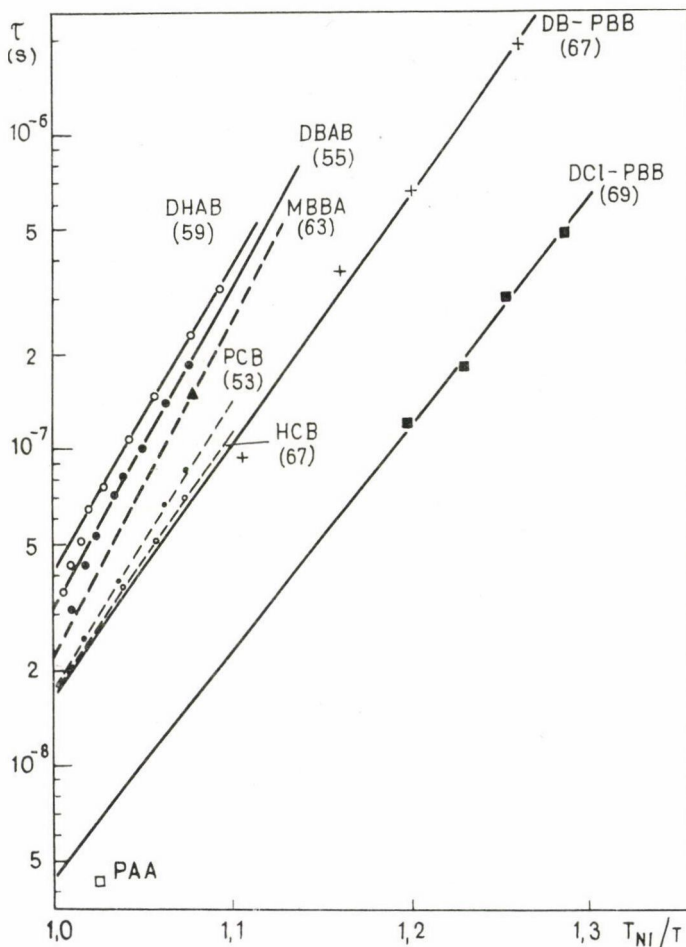


13. ábra. A dielektromos relaxációs idők hőmérsékletfüggése négy észter anyag keverékén. ○ ○ ○ a párhuzamos, τ_1 , τ_2 ; ... a merőleges elrendeződésben mért $\tau_p = \tau_{\perp}$ relaxációs idők

1.2.2. Egykomponensű anyagok vizsgálata

A méréseket az I. táblázatban bemutatott anyagokon végeztük el. Itt minden egyes anyagon végzett méréseinket nem írom le részletesen, mert az előbbieken elmondottakhoz hasonló mérési és kiértékelési eljárásokat alkalmaztunk. A mérések alapján megállapított relaxációs időket és a felőlük meghatározott aktiválási energiákat a 14. ábrán megadom. A hőmérséklet skálát T_{NI}/T -ben vettem fel, hogy a különböző anyagokon kapott adatokat összehasonlíthassam. Ezekből megállapíthatjuk, hogy:

— Az aktiválási energiák a legkülönbözőbb anyagokra közel megegyezőek, legfeljebb három benzolgyűrűs anyagokra ~ 9 kJ/mol-al nagyobbak.



14. ábra. Az alacsony frekvencián mért dielektromos relaxációs idők a hőmérséklet reciprokának függvényében. Zárójelekben az aktiválási energiákat kJ/mol-ban adtuk meg. A szaggatott vonalak az irodalomból vett adatokat mutatják.

— A $T_{NI}/T \rightarrow 1$ -hez extrapolált értékeken lényeges különbségek csak a mindkét végén dipóllal rendelkező (PAA és DCI—PBB) és az összes többi molekula között van. Az eltérés közel egy nagyságrend.

Kézenfekvőnek adódik, hogy az egyes csoportokon belül észlelt eltérések értelmezésénél a molekulák geometriai sajátosságait is vegyük figyelembe. Ezzel a kérdéssel általánosabb szempontok alapján a III. 4. fejezetben foglalkozom.

A 14. ábrán bemutatott relaxációs idők alapján megállapíthatjuk, hogy a fázisátmeneti ponttól elég távol a két és három benzolgyűrűs anyagokon mért relaxációs idők a keverékben tapasztalt módon szétválhatnak. (A 13. ábrán bemutatott relaxációs időknél $T_{NI}/T > 1,25$, mivel ott $T_{NI} \sim 375$ K.)

A szmektikus-A és a nematikus állapot hasonlít egymáshoz abban, hogy dielektromos méréseknél a molekulák mindkét esetben az elektródákra merőlegesen állhatnak, de különböznek is egymástól abban, hogy a S_A állapotban a molekulák tömegközéppontja síkokra rendezett, illetve N állapotban rendezetlen. Molekuladinamikai szempontból érdekes az a kérdés, hogy különbözik-e a molekulák rövid tengely körüli forgása a két állapotban.

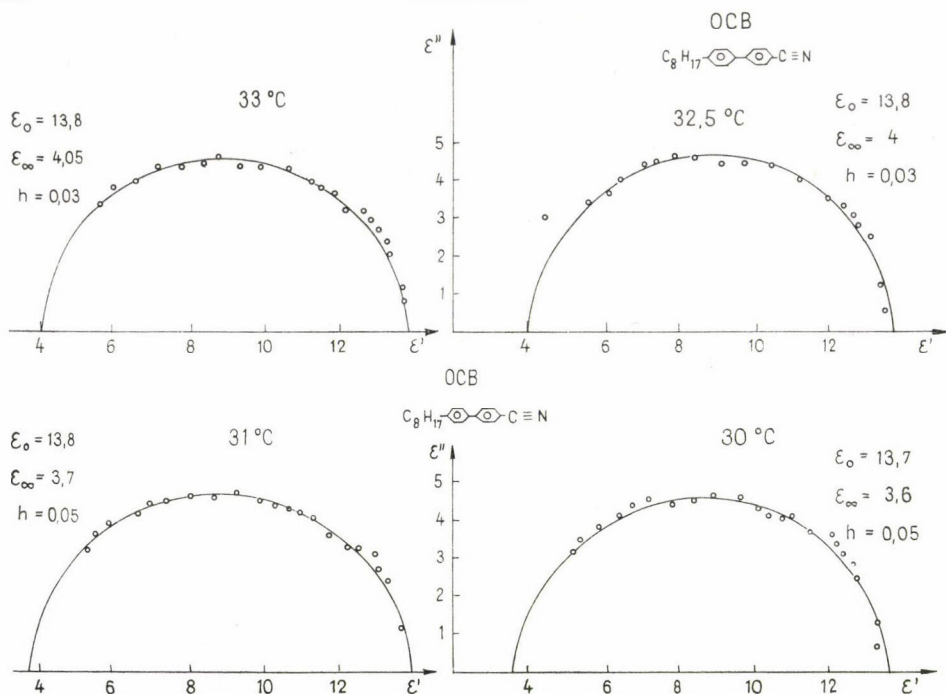
1.2.3. Szmektikus-A és nematikus állapot vizsgálata, fázisátmenetek

A kiválasztott anyagaink közül kettő az OCB és NPOOB S_A és N állapottal is rendelkezik. Mindkét állapotban elvégeztük rajtuk a dielektromos relaxációs vizsgálatokat. Itt a fázisátmenet alatt és felett két-két hőmérsékleten a 15. és 16. ábrákon bemutatott két-két Cole-Cole görbét. Az ábrákon feltüntettem a mérésekből (22) formula segítségével megállapított legfontosabb paramétereket [8], [11].

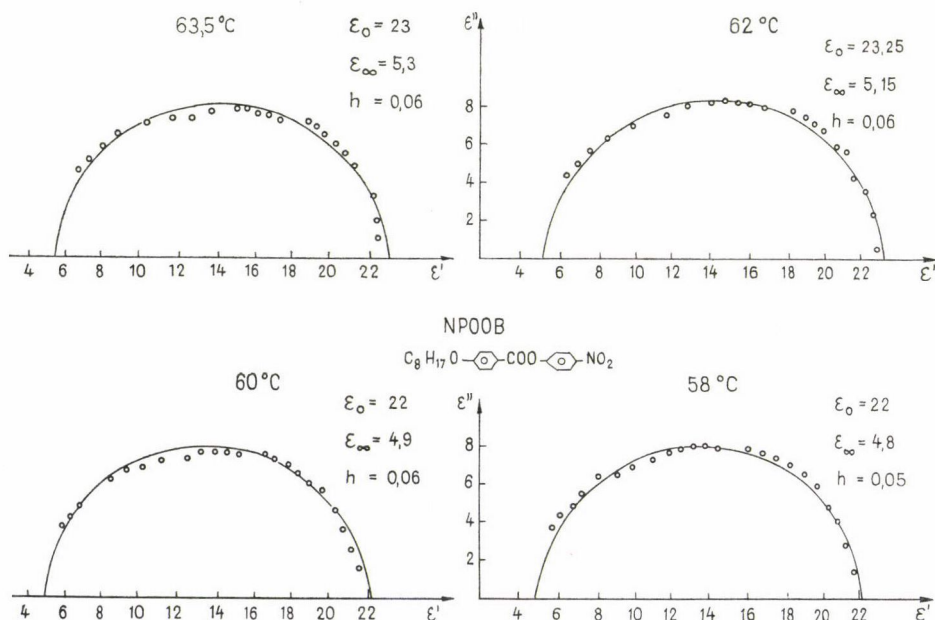
A görbék jellegéből különbséget nem tudunk felfedezni a két állapot között. A mérésekből kiértékelt dielektromos relaxációs időket a 17. ábrán ábrázoltam. A relaxációs idők hőmérsékletfüggéséből szisztematikus különbséget a két állapot között a mérések pontosságán belül nem tudunk felfedezni. A dielektromos állandók hőmérsékletfüggésében ugrást a fázisátmenet jellege szerint várhatnánk. Számos elméleti [Mc71], [Le74] és kísérleti [Je74], [Le76] munka alapján állíthatjuk, hogy a S_A-N fázisátmenet lehet első vagy másodrendű. A fázisátmenet entrópiaváltozása T_{SN}/T_{NI} függvényének tekinthető és $T_{SA}/T_{NI} \lesssim 0,90$ -nél a fázisátmenet másodrendű. Rendparaméterben ugrást $\Delta S \approx 0,050$ J(Kmol) $^{-1}$ -nél kisebb entrópiaváltozásnál már komoly kísérleti feladat kimutatni. *Galerie* [Ga70] tájékoztató jellegű mérésénél CBOOA-n a dielektromos relaxációs időnél nem sikerült ugrást kimutatni. A III. táblázatunkból láthatjuk, hogy az átmeneti hőmérsékletek viszonya és az entrópiaváltozás mind CBOOA-ra, mind NPOOB és OCB közel van a másodrendű fázisátmenetnél tapasztalt értékhez, de mindhárom anyagra a fázisátmenet, ha gyengén is, de elsőrendű. Ezért tettem erőfeszítéseket a mérések és a kiértékelések gondosságának fokozásával arra, hogy legalább NPOOB-nél kimutassam az ugrást, ennek eredményeként láthatjuk, hogy kis törés valóban kimutatható.

A dielektromos relaxáció változását a S_A-N fázisátmenetnél még alig vizsgálták. Az előbb említett mérés az egyetlen, melyről tudunk. Felvetődött az a gondolat, hogy az ugrást az anyagokban található kis szennyezés mossa el.

Az NPOOB anyag a szocialista országok együttműködése keretében készült, tisztaságát kaloriméterrel mi vizsgáltuk meg. Benne és egyéb anyagunkban az összszennyezés nem haladta meg a 0,5 %-ot. A szerves és folyadékkristály-anyagok után-



15. ábra. Az OCB-n mért Cole-Cole görbék. A felső két görbét nematikus, az alsó két görbét szmeztikus-A állapotban mértük. ϵ_0 , ϵ_∞ és h az illesztés során kapott paraméterek.



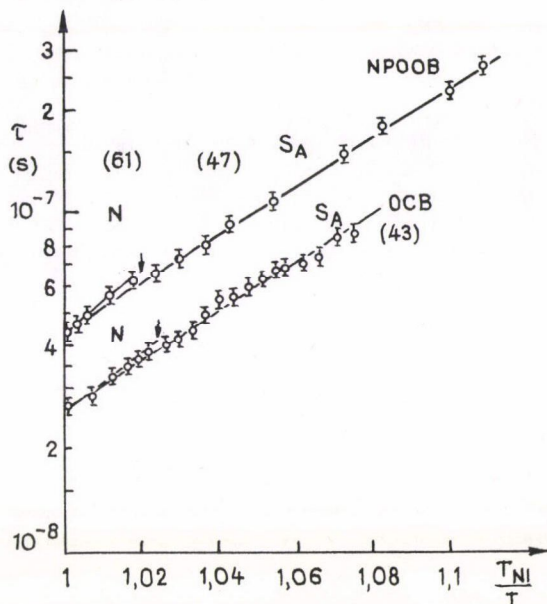
16. ábra. Az NPOOB-n nematikus és szmeztikus-A állapotban mért Cole-Cole görbék. ϵ_0 és ϵ_∞ extrapolált dielektromos állandók, h a relaxációs idő eloszlás függvényének paramétere

tisztítása nehéz feladat, ezzel a kérdéssel mind itthon, mind a szocialista országok együttműködése keretében kívánunk még foglalkozni.

Megjegyezzük, hogy a nematikus-izotrop fázisátmenet döntően elsőrendű.

Számos anyagnál és fizikai paraméternél azonban kis eltérés itt is megfigyelhető. Méréseink alapján (1.14. ábrát) DBAB és DHAB-nél lehajlás figyelhető meg a dielektromos relaxációs időnél a fázisátmenethez közeledve. Részletes vizsgálattal sem sikerült azonban egyelőre még kvalitatív megállapításnál többre jutni. Annyi látszik még valószínűnek, hogy a nematikus izotrop átmenetnél lehajlás akkor nem figyelhető meg, amikor $\mu_{\parallel} \gg \mu_{\perp}$ (pl. HCB, OCB, ...).

Eddig bemutatott dielektromos vizsgálataink során a molekulák dipólmomentumának hossztenge ly irányába eső komponensének mozgását vizsgáltuk. A merőleges komponensének változása, a molekulák hossztenge ly körül végzett forgása magasabb frekvenciákon (GHz) működő mérőhidakkal mérhető ki. Általában is célszerű a teljes frekvencia-tartományban a méréseket elvégezni. Ilyen vizsgálatokat külföldi kooperációban kívánunk elvégezni. A folyadékkristály-állapot egyik legjellemzőbb mozgásformája a molekulák elfordulása a direktortól, azaz a rövidtenge ly körül végzett elfordulás, melynek vizsgálatát itt részletesen bemutatom. A molekulák direktor körül végzett mozgását más módszerrel, rugalmatlan neutronsóróással vizsgáljuk.



17. ábra. Az alacsony frekvenciás dielektromos relaxációs idők OCB és NPOOB anyagokban nematikus és szmektikus-A állapotban. Nyilak a fázisátmenet helyét jelölik.

2. A kvázi-rugalmas neutronsóródás vizsgálata

2.1. Elméleti alapok

Az anyag dinamikai tulajdonságai vizsgálatának legszélesebb lehetőséget nyújtó mérési módszere a rugalmatlan neutronsóródás, mert segítségével a tér-idő korrelációs függvény határozható meg. Mint ismeretes [Ki71], az Ω térszögbe szóródó neutronspektrum, a kétszer differenciális hatáskeresztmetszet inkohere ns szórás esetén

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k}{k_0} (Q, \omega)$$

$$S(Q, \omega) = \int e^{-i(\vec{Q}\vec{r} + \omega t)} G_s(r, t) d\vec{r} dt = \int I(Q, t) e^{i\omega t} dt \quad (24)$$

kapcsolatban van a $G_s(r, t)$ saját és az $I_s(Q, t)$ közbülső korrelációs függvénnyel. Valószínűségi értelmezés alapján $G_s(r, t)$ annak valószínűségét adja meg, hogy ha a $t=0$ időpontban az $r=0$ pontban volt a szóró részecske, t pillanatban az r helyen legyen. Itt $\hbar\vec{Q} = \hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}_0$ a neutron momentum, $\hbar\omega = E - E_0$ a neutron-energia változása. A neutron momentum változása és a nematikus anyagokban észlelt kitüntetett irány, a direktor között levő szöget β -val fogjuk jelölni.

A folyadékkristály anyagokban a neutronokat inkoherensen szóró részecske a hidrogén atom, így neutron szórással valójában a hidrogén atomok mozgásáról szerezhetünk információkat. A molekulákban a hidrogén atomok különböző típusú mozgásokat végezhetnek. E mozgások karakterisztikus ideje különböző, ezért hatásuk a neutron spektrumban többnyire szétválasztható. A kvantált mozgások rugalmatlan, a diffúziós típusú mozgások kvázi-rugalmas szórást eredményeznek. A kvázi-rugalmas szórásnál az energia csere folytonosan változik a nulla érték körül, így az anyagmintára eső „monokromatikus” intenzitás kiszélesedik. A kiszélesedést kezdetben primitíven a folytonos transzlációs diffúziós mozgással kapcsolták össze [Ja71]. E szerint a szórásfüggvény

$$S(Q, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{(D_{\parallel} \cos^2 \beta + D_{\perp} \sin^2 \beta) Q^2}{(D_{\parallel} \cos^2 \beta + D_{\perp} \sin^2 \beta)^2 Q^4 + \omega^2} \quad (25)$$

egyenlettel adható meg, amiből a D_{\parallel} és D_{\perp} diffúziós állandók meghatározhatók. A nyomjelzős technikával mért és a neutronszórásból megállapított diffúziós állandók különbözőknek adódtak. A közölt mérésben további elemi hibát észrevéve (PAA-t elektromos térrel „rendezték”), az interpretálásnak ezt a módját elvettem. A kvázi-rugalmas spektrum kiszélesedésének a momentumváltozás négyzetétől, azaz Q^2 -től való függése méréseink alapján nem egyezett meg ezzel a modellel számítottal. Javasoltam [13], hogy a folytonos rotációs mozgás alapján számítható korrelációs függvénnyel értelmezzük a kvázi-rugalmas szórást $Q > 3 \text{ nm}^{-1}$ esetén. Egész kis momentumcserék esetére a transzlációs diffúziós mozgás hatása természetesen jelentős és figyelembe kell venni [Tö74]. A folytonos rotációs mozgás felvétele lényegesen jobbnak tűnt az egyszerű transzlációs mozgásnál. Részletesebb analízisünk [13], [14] azonban kimutatta, hogy ez a modell sem lehet tökéletes, mert vannak olyan szórési szögek, melyeknél a mért és számított spektrumok nem egyeznek. Ezekután javasoltam [15] a sztochasztikus bolyongás körpályán modell alkalmazását rematikus anyagokban a molekula tengelyek direktor körül történő forgásának leírására. (Tőlünk függetlenül francia kutatók [Vo76] alkalmazták ezt a modellt szmektikus állapotban levő anyag molekuláinak végén levő gyökök mozgásának leírására.)

A folytonos rotációs mozgás analizálását és a kísérletekkel való összehasonlítást [14] itt nem ismertetem, mert az itt részletesen tárgyalt sztochasztikus bolyongás határesetének tekinthető. Ebben a pontban a molekulák mozgásának leírására általam javasolt, illetve kifejlesztett modelleket és kísérleti méréseinket mutatom be.

2.1.1. Bolyongás körpályán

A nematikus anyagokban a molekulák elhelyezkedése henger szimmetriát mutat. A kiszemelt molekula hidrogénje a direktor körül forgó mozgást végez. Ez a mozgás azonban nem egyszerű egytengelyű folytonos rotáció, hanem a szomszédos molekulák gátló hatása miatt sztochasztikus bolyongás körpályán. A kiszemelt

hidrogén tehát d sugarú körpályán mozog, melyen egyenlő távolságra N pont van. Annak valószínűsége, hogy a körön jobbra vagy balra ugorjon egy pontba $P = K_1 \Delta t$. Ha $t=0$ pillanatban az $N \equiv 0$ pontban van a kiszemelt szórópont, akkor annak valószínűsége, hogy t időpontban a j pontban legyen

$$P_{ij}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{-t/\tau_k} \cos \frac{2\pi k(i-j)}{N}, \quad (26)$$

ahol

$$\tau_k^{-1} = 4K_1 \sin^2 \frac{\tau_k}{N}. \quad (27)$$

A modell alapján már megadható a szórásfüggvény [Ba73], amit a neutronszórás segítségével mérhetünk:

$$S(Q, \omega) = A_0(Qd \sin \beta) \delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{N-1} A_k(Qd \sin \beta) \frac{\tau_k}{1 + (\omega\tau_k)^2}. \quad (28)$$

Eddig feltételeztük, hogy az összes molekula hossz tengelye párhuzamos a direktorral. A hőmozgás miatt ez nem teljesül. A molekula tengelyek elhelyezkedését a leg-egyszerűbben

$$P(\theta) \sim e^{-\frac{4,54 S_\theta P_2(\cos \theta)}{T} T_{NI}} \quad (29)$$

Maier—Saupe-eloszlásfüggvénnyel jellemezhetjük. Ezzel az eloszlásfüggvénnyel átlagolva az előbbi szórásfüggvényt a kísérletekkel összevethető spektrumokat kapunk.

Ha az anyagmintánk makroszkopikusan nem orientált, azaz a nematikus tartományok izotropan helyezkednek el, a szórásfüggvény

$$S(Q, \omega) = B_0(Qd) \delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{N-1} B_n(Q, d) \frac{\tau_n}{1 + (\omega\tau_n)^2} \quad (30)$$

alakú, ahol

$$B_n(Q, d) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N-1} I_0 \left(2Qd \sin \frac{\pi l}{N} \right) \cos \frac{2\pi l n}{N} \quad (31)$$

$$\tau_n = \frac{\tau}{2 \sin^2 \frac{\pi n}{N}}, \quad \tau = \frac{1}{K_1} \quad (32)$$

Abban az esetben, amikor a körpályán elég sok pont van, azaz $N \rightarrow \infty$, akkor a modell a folytonos egytengelyű forgás modelljébe megy át és a diffúziós állandót

$$D_r = \frac{1}{\tau_1} \quad (33)$$

összefüggés alapján kapjuk meg. N megbecslése igen nehéz feladat. Ehhez a molekulák között levő kölcsönhatások potenciál görbáját kellene kiszámítani. A molekulán belül történő forgásoknál azonban ez már közelítőleg számolható, ahogy a 2.1.3. pontban látni fogjuk. Nematikus anyagokban a molekulák rövid tengelyük

körül is elfordulhatnak, azaz a molekulatengelyek az előbbi modellben rögzített körpályáról kiugorhatnak. A lehetséges tengelyirányokra való előbbi pontban említett átlagolással azt nem vesszük figyelembe, hogy a rövid tengely körül végtelen kimozdulás is egy relaxációs folyamat. Ezt az általunk kidolgozott [17], a bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel modell segítségével tudjuk figyelembe venni.

2.1.2. Bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel

Vegyük fel a koordinátarendszer z tengelyét a direktor irányába. Annak valószínűsége, hogy egy molekula hossztengelye ϑ szöggel hajoljon el a direktortól, legyen $P(\vartheta)$. A kiszemelt molekula hidrogénje az előbbi modellnek megfelelően végezzen bolyongást körpályán, melyen N pont van és így az elfordulás szöge

$$\varphi_i = \frac{2\pi i}{N}, \quad 0 \leq i \leq N-1. \quad (34)$$

Legyen a gömb felületén a 18. ábrán látható módon M paralel kör. Ha a kiszemelt hidrogén az l -edik körön van, a direktorhoz viszonyított kihajlás szöge

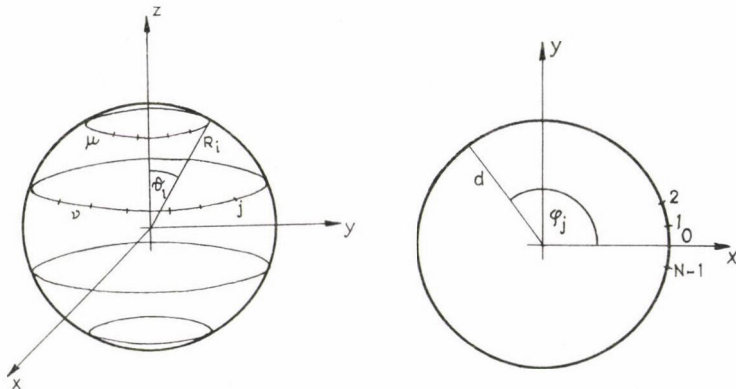
$$\vartheta_l = \pi \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)}{M}, \quad 0 \leq l \leq M-1. \quad (35)$$

Annak valószínűsége, hogy a kiszemelt pont ugyanazon a körön ugorjon egyik helyről a másikra, az előbbi modellhez hasonlóan legyen

$$P_1 = K_1 \Delta t. \quad (36)$$

Adjuk meg a lehetőségét annak, hogy a kiszemelt pont a szomszédos körök valamely pontjára is átugorhasson. Legyen ennek valószínűsége

$$P_2 = K_2 \Delta t. \quad (37)$$



18. ábra

Itt Δt egy ugrás ideje, K_1 és K_2 állandók. Ezek után megadható [17] annak valószínűsége, hogy a kiszemelt pont a μ kör i helyéről a ν kör j helyére jusson t idő alatt:

$$P_{ij}^{\mu\nu}(t) = \frac{1}{NM} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{M-1} \cos \frac{2\pi k(i-j)}{N} \cos \frac{2\pi l(\mu-\nu)}{M} e^{-t/\tau_{kl}}, \quad (38)$$

ahol

$$\tau_{kl}^{-1} = 4K_1 \sin^2 \frac{\pi k}{N} + 4K_2 \sin^2 \frac{\pi l}{M}. \quad (39)$$

Bevezetve a

$$\begin{aligned} q_{\parallel} &= 2Q R_i \cos \beta \\ q_{\perp} &= 2Q R_i \sin \beta \end{aligned} \quad (40)$$

jelöléseket, a szórásfüggvényre

$$S(Q, \omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{r=0}^{M-1} \frac{\tau_{kr}}{1 + (\omega\tau_{kr})^2} B_{kr} \quad (41)$$

kifejezés adódik, ahol

$$\begin{aligned} B_{kr} &= \frac{1}{NM} \sum_{l=0}^{M-1} P(\vartheta_l) \sum_{j=0}^{N-1} \cos \frac{2\pi kj}{N} \sum_{l'=0}^{M-1} J_0(q_{\perp} d_{ll'}^j) \cos \frac{2\pi r(l-l')}{M} \\ &\quad \cos \left\{ q_{\parallel} \sin \frac{\pi(l+l'+1)}{2M} \sin \frac{\pi(l-l')}{2M} \right\} \end{aligned} \quad (42)$$

$$d_{ll'}^j = \left[\sin \frac{2\pi(l-l')}{2M} \cos^2 \frac{\pi(l-l'+1)}{2M} + \sin \frac{\pi \left(l + \frac{1}{2} \right)}{M} \sin \frac{\pi \left(l' + \frac{1}{2} \right)}{M} \cdot \sin^2 \frac{\pi j}{N} \right]^{1/2} \quad (43)$$

Láthatjuk, hogy $K_2=0$ vagy $M=1$ esetében a korábbi modell eredményeit kapjuk. Abban az esetben, amikor $K_1 \gg K_2$

$$\begin{aligned} \tau_{k0} &= \left(4K_1 \sin^2 \frac{\pi k}{N} \right)^{-1} \quad \text{ha } k \neq 0 \\ \tau_{kl} &\approx \\ \tau_{0l} &= \left(4K_2 \sin^2 \frac{\pi l}{M} \right)^{-1} \quad \text{ha } k \neq 0 \end{aligned} \quad (44)$$

és a szórásfüggvény

$$S(Q, \omega) = \sum_{r=0}^{M-1} L_{0r}(\omega) A_1(r) + \sum_{k=1}^{N-1} L_{k0} A_2(k), \quad L_{kr}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\tau_{kr}}{1 + (\omega\tau_{kr})^2} \quad (45)$$

két összegre válik szét, melyben az első a molekula rövid tengelye körül történő elfordulásait írja le és egy keskeny spektrumot eredményez, míg a másik tag a molekula direktor körül végzett forgását írja le és az előbbinél szélesebb spektrumot

eredményez. Itt a

$$A_1(r) = \frac{1}{M} \sum_{l'=0}^{M-1} P(\vartheta_{l'}) \sum_{j=0}^{N-1} I_0(q_{\perp} d_{l'j}^i) \cos^2 \frac{\pi r(l-l')}{M} \times \\ \times \cos \left\{ q_{\parallel} \sin \frac{\pi(l-l')}{2M} \sin \frac{\pi(l+l'+1)}{2M} \right\} \quad (46)$$

$$A_2(k) = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{M-1} P(\vartheta_l) \sum_{j=0}^{N-1} I_0 \left(q_{\perp} \sin \vartheta_l \sin \frac{\pi j}{N} \cos^2 \frac{\pi k j}{N} \right) \quad (47)$$

jelöléseket alkalmaztuk.

Abban az esetben, amikor $K_1 \ll K_2$ a két spektrum szerepe felcserélődik. Amikor a két állandó megegyezik az ugráló forgó mozgás gömbfelületén modellt kapjuk.

2.1.3. Bolyongás reflektáló falú pályán

A molekulák végein levő gyökök helyzete PCILO módszerrel [Ku77] számolható. Különösen érdekes esetünkben a butilok lehetséges helyzetének vizsgálata. Butilban a CH_3 három helyzete között egyenlő magasságú potenciálfalak adódtak. A C_2H_5 lehetséges helyzeteinél azonban már nem egyenlő magasságú potenciál fal választja el a három helyzetet. Hasonló mondható el az egész butil forgásánál. A gyökök mozgásának leírására ezért reflektáló fallal határolt bolyongást célszerű kidolgozni [Ku77]. A korábbiakhoz hasonlóan könnyen megadható annak valószínűsége, hogy a kiszemelt pontunk N számú pont között az i helyről a j helyre ugorjon, nevezetesen

$$P_{ij}(t) = \frac{1}{N} \left[\sum_{l=1}^{N-1} 2e^{-t/\tau_l} \cos \frac{(2i-1)l\pi}{2N} \cos \frac{(2l-1)j\pi}{2N} + 1 \right]. \quad (48)$$

A szórásfüggvényre a korábbiakhoz hasonlóan

$$S(Q, \omega) = A_N(Q) \delta(\omega) + \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{N-1} A_l(Q) \frac{\tau_l}{1 + (\omega\tau_l)^2} \quad (49)$$

kifejezés adódik, ahol

$$\tau_l^{-1} = 4K \sin^2(\pi l/2N) \quad (50)$$

$$A_l(Q) = \frac{1}{N} \left[\sum_{k=1}^N 2 \cos \frac{2N-1}{2N} k\pi \cos \frac{2k-1}{2N} l\pi \right] j_0 \left(2Qd \sin \frac{\pi k}{N} \right). \quad (51)$$

Ebben a fejezetben leírt mozgások kísérleti vizsgálatára rugalmatlan neutronszerzés vizsgálatával nyílik lehetőség.

2.2. Kísérleti vizsgálatok

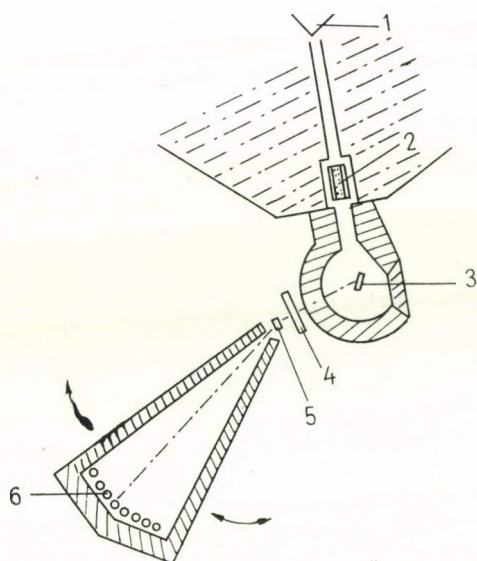
Az eddig említett mozgások a neutron spektrumokban kvázirugalmas kiszélesedést eredményeznek. A kvázirugalmas neutron spektrumok vizsgálatához repülési idő spektrométert célszerű használni [Ki71]. A korábbi neutron spektrométerünket [18] ezért korrelációs repülési idő spektrométerre alakítottuk át. A monokromatikus

neutronnyalábot pirolitikus grafit egykristállyal állítottuk elő, a magasabb reflexióktól hűtött berillium szűrővel szabadultunk meg. A monokromatikus neutronnyalábot egy sztochasztikus neutronszagatóval monoenergiás neutron impulzusokká alakítottuk. A spektrométer sematikus rajza a 19. ábrán látható.

Az 1 mm-es vastag anyagmintát kettősfalú alumínium tartóba helyeztük, melyben a hőmérsékletet $\pm 0,1^\circ\text{C}$ pontossággal tudtuk tartani. A PAA negatív dielektromos anizotrópiával rendelkezik, így elektromos térrel nem rendezhető. A DB-PBB és DCI-PBB széles hőmérséklettartományban nematikus, pozitív dielektromos anizotrópiájú és elektromos térrel rendezhető. Az alkalmazott elektromos tér nagyságát a kondenzátor lemezei közé tett anyag kapacitásának mérésével állítottuk be. A rendező tér értékét 0,7 T mágneses tér hatásával ekvivalensnek választottuk.

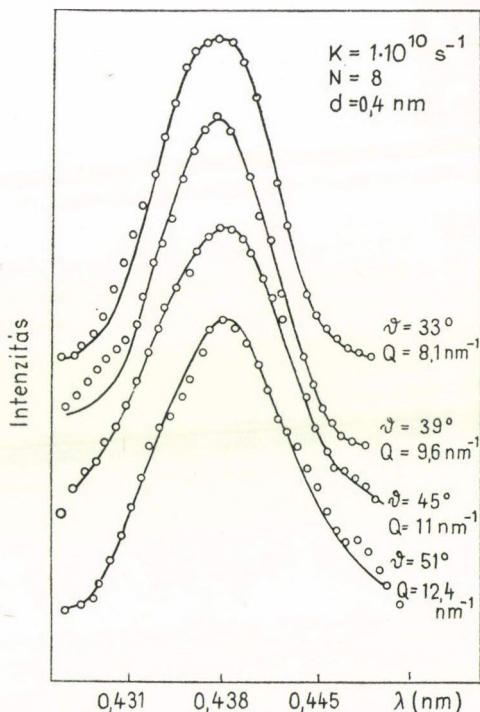
A mintára eső neutronok energiája $(6,82 \pm 0,11) \cdot 10^{-22}$ J. A mintán szórt neutron spektrumot a repülési idő függvényében hélium neutrontetektor után kapcsolt analízátorral detektáltuk.

Rendezet'en PAA anyagmintán mért neutron spektrumokat a (30) formula alapján számított neutron spektrumokkal a 20. ábrán hasonlítom össze. Rendezett



19. ábra. A neutron spektrométerünk sematikus rajza

1 Aktív zóna; 2 Nitrogénnel hűtött berillium szűrő; 3 Grafit egykristály monokromátor goniméteren; 4 Stochasztikus neutron-szagató; 5 Az anyagminta; 6 Neutron detektorok; 7 Védelmek



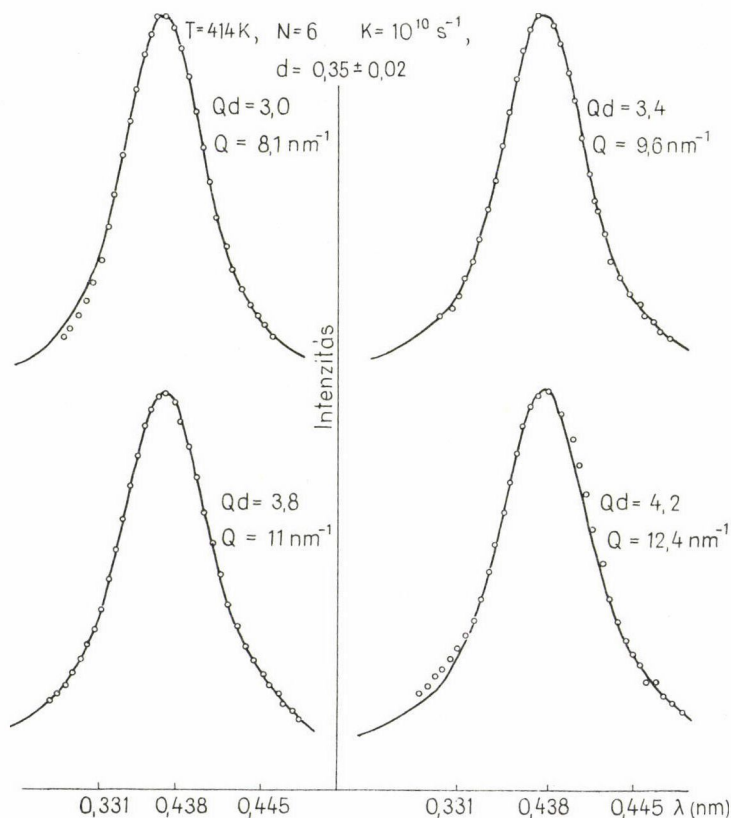
20. ábra. PAA-on 121 °C-on különböző θ szórási szögekben, illetve Q momentum változásnál mért kvázi-rugalmas spektrumok ○○○, és a bolyongás körpályán modellel K, N és d paraméterekkel számolt (behúzott) spektrumok

és rendezetlen DB-PBB és a DCI-PBB mintán mért neutron spektrumokat a 22., 23. és 24. ábrákon mutatom be [16].

A mért neutron spektrumokat az előző pontban ismertetett modellek segítségével számolt spektrumokkal hasonlítjuk össze.

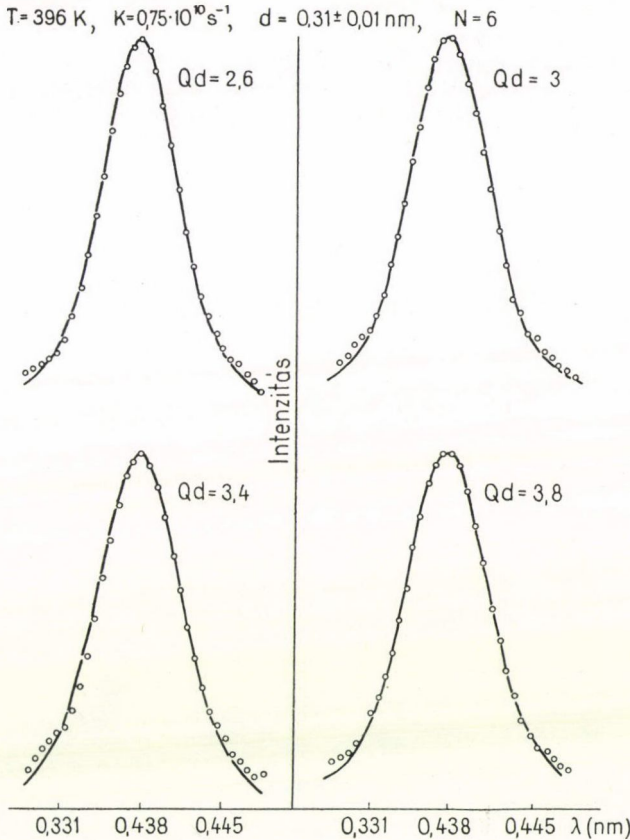
A bolyongás körpályán modell egytengelyű forgást ír le. Amikor a molekulák bolyongását a direktor körül ennek segítségével akarjuk leírni, a számolás és mérési eredmények összehasonlításánál az N , d és τ paramétereket határozzuk meg. Egy hőmérsékleten, különböző szögekben mért spektrumokból három paramétert megállapítani soknak tűnik, de elég nagy N -ek esetén az N jelentősége lecsökken, mert a mozgás már majdnem folytonos mozgássá válik. Mindenesetre, mint a 20. ábrán láthatjuk, PAA-nál makroszkopikusan rendezetlen mintán a bolyongás körpályán modell alkalmazása sikeresnek mondható.

A molekulák direktor körül történő mozgásának leírására felhasznált modellt jobban ellenőrizhetjük a DB-PBB-n és DCI-PBB-n mért spektrumok értelmezésével, mert ezek az anyagok széles hőmérséklet-tartományban nematikusak és a kísérleti



21. ábra. Elektromos térrel nem rendezett DB-PBB-n különböző Q értékeknél mért $\circ \circ \circ$, és a bolyongás körpályán modellel K , N és d paraméterekkel számolt — kvázi-rugalmas spektrumok

feltételeink mellett könnyen rendezhetők. A bolyongás körpályán modell sikerét rendezetlen DB-PBB mintán végzett méréseknél a 21. ábrán most is megcsodálhatjuk. A mérésekből megállapított relaxációs időket a 25. ábrán bemutatam. Ennél a mérésnél már 12 spektrumból lényegében 7 paramétert (3 db τ , 3 db d és N) állapítottam meg úgy, hogy a 3–3 paraméter között értelmezhető hőmérsékletfüggő kapcsolatot kaptam.



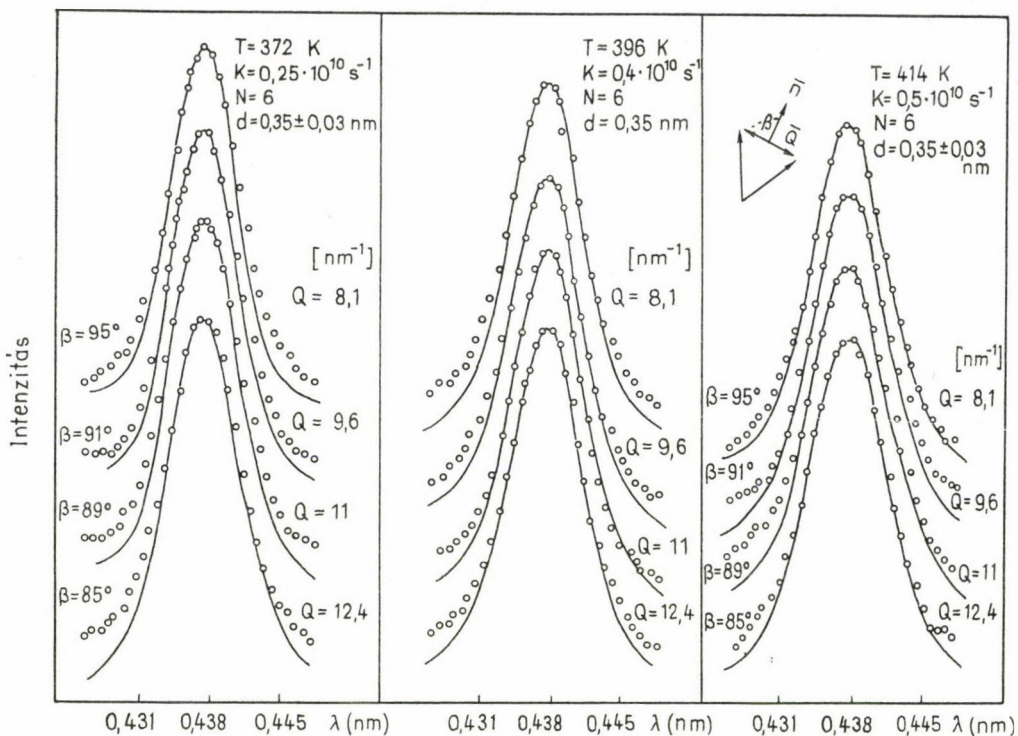
22. ábra. Elektromos térrel nem rendezett DB-PBB-n különböző szórési szögekben mért $\circ \circ \circ$ és számolt — kvázi-rugalmas spektrumok

A 23. ábrán a rendezett DB-PBB mintán mért spektrumokat a (28) formula alapján számolt spektrumokkal hasonlítottam össze, melynek során 12 spektrumból 5 paramétert állapítottam meg.

A rendezett DB-PBB mintán mért és a (28) formula alapján számolt spektrumok 23. ábrán látható összehasonlítása alapján azt is láthatjuk, hogy a spektrumok szélénél a két görbe összeesése nem tökéletes. Ebből két következtetést vonhattam le. A rendezett mintán végzett mérések elég pontosak ahhoz, hogy a molekulák mozgá-

sának pontosabb leírására törekedjünk, továbbá a megállapított relaxációs folyamat mellett még más folyamatnak is jelen kell lennie.

A dielektromos mérések alapján tudjuk, hogy hosszabb idejű mozgások is lejátszódhatnak, nevezetesen a molekula elfordulhat a rövid tengelye körül. Ez a jelenség összekapcsolható a körpálya sugarának fizikai jelentésének keresésével, ugyanis



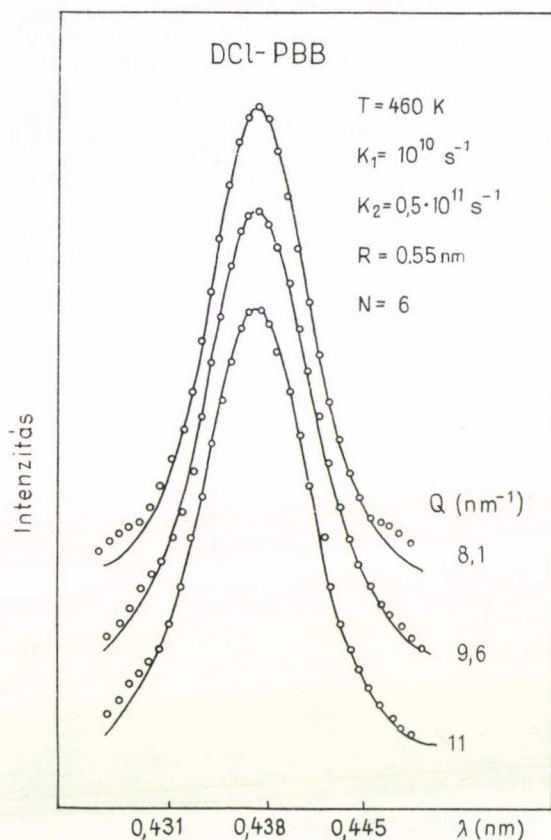
23. ábra. Rendezett DB-PBB minták különböző hőmérsékleten és momentum változásnál mért $\circ \circ \circ \circ$, és a bolyongás kör pályán modellel számolt — kvázi-rugalmas neutron spektrumok

a molekula elfordulása során más-más körpályára ugorhat. Ennek a figyelembevételére dolgoztuk ki a bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel modelt.

A dielektromos méréseinknél bemutatott hosszú relaxációs idők ($\tau \approx 10^{-7}$ sec) felvételével bolyongás gömbfelületen modellel a spektrométerünkkel rögzített felvételeknél lényegében rugalmas spektrumokat eredményeznek, így ezek hatása leválasztható. (A $\delta(\omega)$ függvénye építhető.)

A rövidebb idejű relaxációs folyamatokat általában a molekula végein levő — esetünkben butil-gyökökön belül megvalósuló mozgásokhoz kapcsolhatjuk. A butilon belül megvalósuló (nem kvantált) mozgások sajátosságainak felderítésére, kérésünkre kvantumkémiai PCIO módszerrel *Kugler S.* [Ku77] kiszámolta a gyökön belül a lehetséges helyzetekhez tartozó (barriereket) potenciálokat.

A szochasztikus modelleinkkel kiszámoltuk, hogy milyen neutron spektrumokat kaphatnánk ilyen potenciál gödrökbe való ugrálások esetén. A számolt spektrumokat reflektáló falú bolyongás esetén a 25. ábrán bemutatom. Ebből megállapítottam, hogy $K \approx 10^{10} \text{ s}^{-1}$ körüli értékeket leszámítva a spektrum széleinél ezeknek a moz-

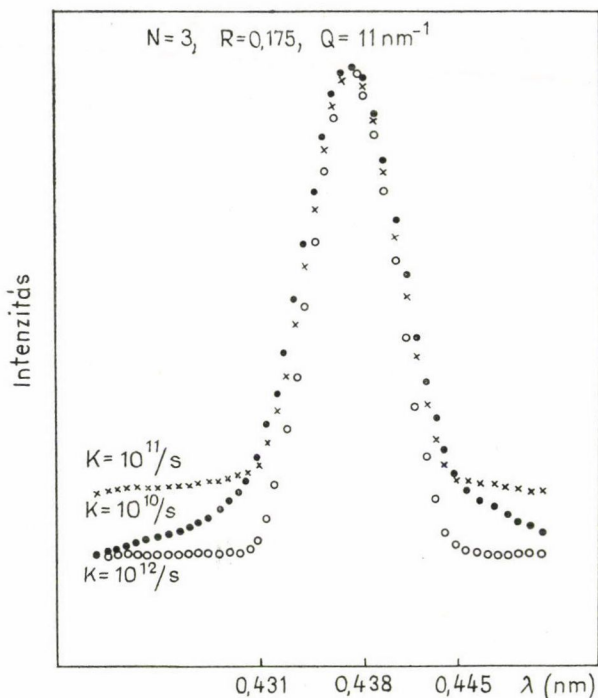


24. ábra. A DCl-PBB minták különböző szögekben mért $\circ \circ \circ$, és bolyongás gömbfelületen modellel számolt — kvázi-rugalmas neutron spektrumok. R a hidrogén atomoknak a molekula tömegközéppontjától mért átlagos távolsága. K_1 , K_2 , és N a modell illesztési paraméterei

gásoknak a járuléka állandónak tekinthető, illetve olyan K értékeknél figyelhető meg a mérésekhez hasonló jellegű spektrum, melyeket már a bolyongás körpályán modellel megállapítottunk. (Itt R különbözik!) Szükségessé vált ezekután a molekula törzsek mozgásának közvetlen vizsgálata.

A molekula törzsek mozgásának vizsgálatát a végek mozgásának tanulmányozásától úgy választhatjuk szét, hogy a molekula egyik részében a hidrogéneket deuteriumra cseréljük ki. Ez az eljárás rendkívül költséges! Mi e helyett a DB-PBB-hez

nagyon hasonló anyagot szintetizáltattunk. Ez az anyag a DCI-PBB. A kérdés ezek után az volt, hogy DCI-PBB-n más jellegű (a széleknél keskenyebb) spektrumokat kapunk-e, mint DB-PBB-nél. Ennek eldöntésére ugyanannál a T_{NI}/T hőmérséklet-viszonynál egymásra rajzoltam a mért spektrumokat. Ezt mutatom be a 26. ábrán. Láthatjuk, hogy a spektrumok mennyire hasonlóak. Ezek alapján összhangban a 25.

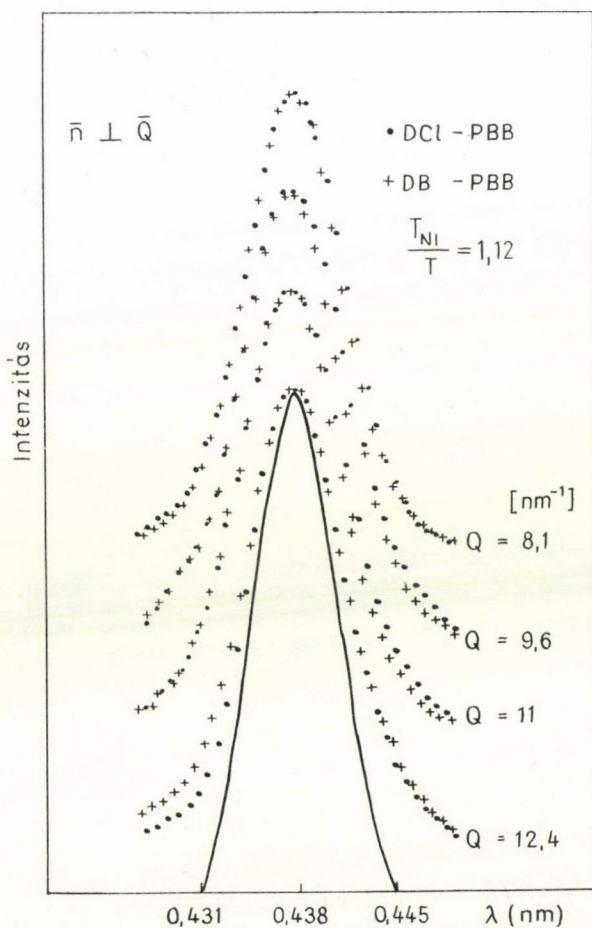


25. ábra. A bolyongás reflektáló falú pályán modellel különböző K paraméterekkel és rögzített N, R, Q értékekkel számolt neutron spektrumok

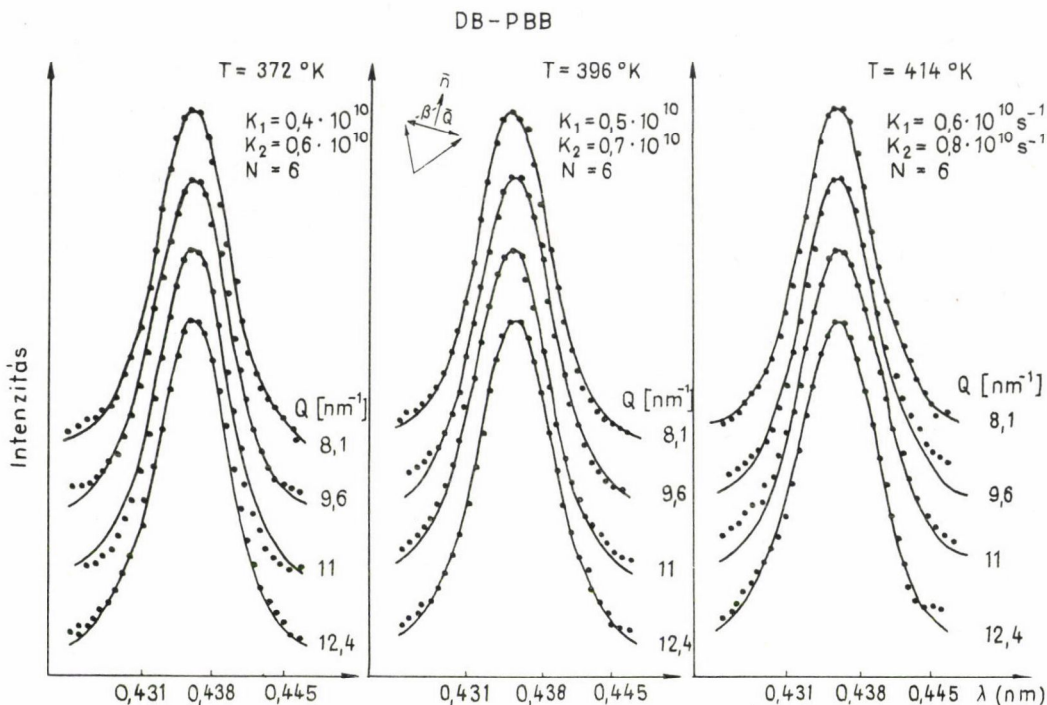
ábrán bemutatott spektrumok kapcsán levont következtetéssel, állíthatjuk, hogy a 23. ábrán megfigyelt eltéréseket nem helyes a molekulák végein található gyökök gyorsabb mozgásával értelmezni.

Ezek után a bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel modellünket alkalmaztam a mért neutron spektrumaink kiértékelésére. Ezzel a modellel nem hozok be újabb paramétert! A modellben szereplő R_i sugár ugyanis a molekula tömegközéppontjának a molekula i -edik hidrogénjeitől mért távolsága. Ez a molekula a geometriai adatai alapján kiszámolható. Az összes R_i -vel kiszámoltuk a szórás-függvényeket és összegeztük azokat. A modellünk segítségével így számolt spektrumokat a 27. ábrán hasonlítom össze a kísérletileg mért spektrumokkal. Az illesztésekből meghatározott $\tau_r = 1/K_1$ és $\tau_t = 1/K_2$ paramétereket a 28. ábrán mutatom be a hőmérséklet függvényében. A relaxációs idők aktiválási energiáira 10 és 14 kJ/mol értékek adódtak.

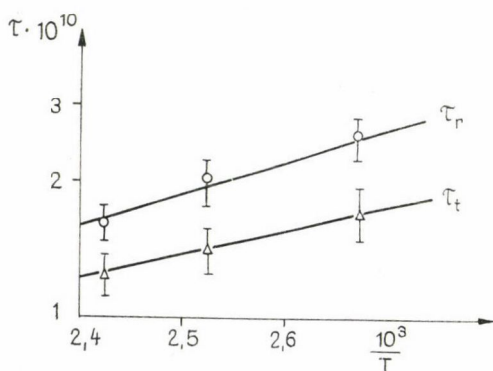
A bolyongás gömbfelületen modellünk sikerét a DCI-PBB-n végzett méréseink — 24. ábra — alapján is megállapíthatjuk. Fel kell figyelniük arra az eredményre, hogy a két relaxációs idő alig különbözik egymástól. Ez a korábbi interpretációk alapján váratlan eredménynek mondható, amiből új következtetésre jutottam. Nematikus állapotban a molekulák (legalábbis DB-PBB és DCI-PBB esetében) egyrészt sztochasztikus bolyongást végeznek a direktor körül, másrészt a molekula tengelyükkel elbillennek a direktorral bezárt irányukból. A molekula a direktor körül billegő bolyongást végez és erre adtam itt egy modellt. Ezt a billegő-fluktuációs mozgást meg kell különböztetni attól a molekula rövid tengelye körül történő el-



26. ábra. A DB-PBB és a DCI-PBB anyagmintákon mért neutron spektrumok összehasonlítása. A behúzott görbe a mintára eső spektrumot mutatja. A két anyagmintán a T_{NI}/T hőmérséklet viszony megegyezik.



27. ábra. Rendezett DB-PBB mintán különböző T hőmérsékleten és Q momentum változásnál $\circ \circ \circ$ mért és a bolyongás gömb felületen modellel — számolt kvázi-rugalmas neutron spektrumok az illesztési paraméterekkel. β a Q momentumváltozás és a n direktor között lévő szög.



28. ábra. A bolyongás gömbfelületen modell segítségével meghatározott relaxációs idők a reciprok hőmérséklet függvényében

fordulástól, amit dielektromos relaxáció vizsgálatával az előbbiektől megállapítottunk, mert az lényegesen hosszabb idejű mozgás. Viszont megállapításom alapján várni lehet, hogy dielektromos méréseknél nagyfrekvencián is megjelenik ϵ_{\parallel} -ben egy relaxációs folyamat ennek a billegő mozgásnak megfelelően. Valóban Axmann [Ax66] PAA esetében ϵ_{\parallel} -ben megtalált egy ilyen relaxációt. Az eddig végzett méréseknél azonban olyan anyagokat vizsgáltak, melyeknél μ_{\perp} nem volt elhanyagolható μ_{\parallel} -hez képest, ezért az ϵ_{\parallel} -ben talált nagyfrekvenciás diszperziót μ_{\perp} hatásának, azaz a molekula folytonos hossz-

tengely körüli forgásának hatásával értelmezték [Ma71]. Nyilvánvaló, hogy olyan anyagokon kellene most már nagyfrekvencián is diszperziót mérni, melyeknél csak μ_{\parallel} komponens van. Mi igyekszünk OCB-n és NPOOB-n külföldi kooperációban ilyen méréseket elvégezni.

3. A dinamikai jelenségek egységes értelmezése [18]

Az eddig bemutatott eredmények lehetővé teszik, hogy a dielektromos és a neutronszórás vizsgálatok során tett megállapításainkat egységesen értelmezzük.

A folyadékkristályok egyik jellemzője az orientációs rendezettség. Maier és Saupe [Ma60] szerint a molekulák egyrészcseke orientációs potenciálja első közelítésben

$$U(\cos \theta) = -4,54kT_{NI} S_{\theta} P_2(\cos \theta) \quad (52)$$

összefüggéssel adható meg. E szerint a molekula abban a két esetben van a potenciálgödörben, amikor a hossztengetyének a direktorral bezárt szöge 0 vagy π . A molekula rövid tengelye körüli elfordulása során

$$q_{\theta} \approx 6,81 S_{\theta} kT_{NI} \quad (53)$$

mélységű potenciálfalon ugrik át. Ha a molekulának két lehetséges helyzete van, akkor, mint a (28) formulából is megállapíthatjuk, egyetlen relaxációs idő jellemzi a folyamatot. Valóban, mint a 14., 15., 16. és 17. ábrákon bemutatott eredményeknél láttuk, az alacsony frekvenciás dielektromos relaxációs folyamatot egy relaxációs idő jellemzi. Megjegyezzük, hogy a potenciál mélysége az aktiválási energiával is kapcsolatba hozható. Az alacsony frekvenciás dielektromos méréseknél tehát a molekula két lehetséges orientációs elhelyezkedéséhez tartozó relaxációs folyamatot vizsgáljuk.

Mi a billegő-forgó mozgásra neutronszórással, mások pedig a nagyfrekvenciás dielektromos méréssel azt kapták, hogy az aktiválási energiák 10–15 kJ/mol értékkel rendelkeznek. Az előző mozgás aktiválási energiáihoz képest (~ 60 kJ/mol) ezek kicsinyek, ami arra utal, hogy a molekulák billegő-forgó mozgása lényegesen alacsonyabb potenciálokon való átugrálásokon keresztül történik, azaz a mozgás szabadabbnak tekinthető, a molekulának több lehetséges helyzete lehet a billegő-forgó mozgása során ($N \geq 6$, $M \geq 6$). Ekkor a sztochasztikus mozgásuk folytonos diffúziós mozgással közelíthető, ami azzal az előnnyel is jár, hogy a relaxációs időket a potenciál mélységével összekapcsolhatjuk. A billegő-forgó mozgás leírására javasolom a

$$A_{\Omega} G(\vartheta, \vartheta_0, \varphi, \varphi_0, t) - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial \vartheta} (M_{\vartheta} G) - \frac{1}{kT} \frac{\partial}{\partial \varphi} (M_{\varphi} G) = 2\tau_0 \frac{\partial G}{\partial t} \quad (54)$$

kiegészített diffúziós egyenletet. Itt $G = G(\vartheta, \vartheta_0, \varphi, \varphi_0, t)$ annak valószínűsége, hogy a molekula egy pontját ϑ és φ helyen találjuk a t pillanatban, ha az $t=0$ pillanatban a ϑ_0, φ_0 helyen volt. τ_0 az izotrop állapotban mért relaxációs idő.

Itt Debye rotációs diffúziós egyenletét két taggal egészítettem ki. Az első $\frac{\partial}{\partial \vartheta} (M_{\vartheta} G)$ tag azt veszi figyelembe, hogy a molekulák folyadékkristályokban a hossz-

tengelyükkel egy irányba igyekeznek maradni, azaz rájuk

$$M_g = -\frac{\partial U_g}{\partial g} \quad (55)$$

forgató nyomaték hat.

Az $U_g = -aS_g P_2(\cos g)$ alakot (hengerszimmetriát) tételeztem fel a billegő mozgás potenciáljára. Ilyen alakú potenciállal, (52)-vel *Martin, Meier és Saupe* [Ma71], valamint *Nordio* [No72] kiegészítették már a rotációs diffúzió egyenletét. Amikor a potenciálra (52) összefüggést tételezték fel, nem kaptak a kísérletekkel megközelítően sem egyező eredményeket.

A második tag a molekula hossztengele körül forgása során fellépő potenciál hatását veszi figyelembe. Ha a molekulának N helyzete van

$$M_\varphi = -\frac{\partial U_N}{\partial \varphi}, \quad (56)$$

ahol

$$U_N(\cos \varphi) = -bS_\varphi \cos N\varphi. \quad (57)$$

Ebben az általános formában még nem oldották meg az (54) egyenletet. De ha csak az első $\frac{\partial M_g G}{\partial g}$ tagot vesszük figyelembe, felhasználhatjuk *MMS* és *Nordio* megoldásait.

Feltesszük, hogy U_g potenciál mélysége q_g a kísérletileg mért aktiválási energiák arányában kisebb q_θ -nál, azaz

$$q_g \approx \frac{10}{60} q_\theta. \quad (58)$$

Ha a potenciál mélységét a

$$A_g = \frac{q_g}{kT} \quad (59)$$

dimenziótlan mennyiségben mérjük, a billegő mozgásnál $A_g \approx 1$ értéket kapjuk a rövid tengely körüli elfordulásra megállapítható $A_\theta \approx 7$ helyett, ugyanis $S_\theta \approx 0,7$ és $T_{NI} = 350 \text{ K}$ jellegzetes értékek vehetők fel becslésként.

Ekkor a [Ma71] cikkben közölt grafikonokból megállapíthatjuk, hogy $A \approx 1$ esetében

$$\begin{aligned} \tau_{||} &= 1,3\tau_0, \quad 0,17\tau_0, \dots \\ \tau_{\perp} &= 0,87\tau_0, \quad 0,17\tau_0, \dots \end{aligned} \quad (60)$$

relaxációs idők lépnek fel dielektromos méréseknél. Az interpretálásom alapján tehát azt állapíthatjuk meg, hogy

— a billegő-forgó mozgásokhoz tartozó relaxációs idők csak kis mértékben különböznek egymástól és az izotrop relaxációs időktől. Ez a megállapítás egyezik a nagyfrekvenciás dielektromos mérések által szolgáltatott kísérleti eredményekkel [Ax66].

— Nem egy relaxációs idő, hanem több, azaz azok valamilyen eloszlása jellemzi a billegő-forgó mozgásokat. Valóban a kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a nagyfrekvenciás dielektromos folyamatoknál a (22) formula alapján meghatározható paraméter $h \approx 0,2-0,3$.

Hangsúlyozom, hogy az interpretálásom abban különbözik a Martin és társai értelmezésétől, hogy a billegő-forgó mozgás leírására használtam az (54) egyenletet, míg ők az alacsony frekvenciás dielektromos relaxáció értelmezésére használták, így a kísérletekkel összhangban levő eredményeket kaptam; ők nem. Értelmezésünk alapján nyilvánvaló az általuk elkövetett hiba.

Debye az (54) típusú rotációs diffúziós egyenlet felírásánál feltételezte, hogy a forgó mozgás relaxációs ideje kapcsolatba hozható a viszkozitással. A következő fejezetben ezt a kérdést is megvizsgálom.

4. A dielektromos relaxációs idő és a viszkozitás kapcsolata

Makroszkopikus és mikroszkopikus mennyiségek között kapcsolatok teremtmése újra és újra felvetődik a fizikában. Az egyik korai próbálkozás e téren az Einstein—Stokes-formula levezetése volt, mely a mikroszkopikus diffúziós állandót a makroszkopikus viszkozitási együtthatóval kapcsolja össze. Ennek analógiájára vezette be Debye a D_r rotációs diffúziós állandó és a ξ viszkozitás között a

$$D_r = \frac{1}{2\tau} = \frac{kT}{\xi} \quad (61)$$

összefüggést. Itt τ a rotációs relaxációs idő. A paramétereknek ez az összekapcsolása nem járt nagyobb sikerrel, mint az Einstein—Stokes-formula esetében. Ezekután juthatunk arra a következtetésre, hogy a mikroszkopikus paraméterekhez nem ismerjük valójában a megfelelő viszkozitást. Különösen érdekes ez a kérdés folyadékkristályok esetében, mert nematikus anyagoknál öt viszkozitási együttható, ún. Leslie-paraméter [Dg74] szükséges a hidrodinamikai jelenségek leírásához. Így felvetődhet, hogy közülük könnyebb a megfelelő viszkozitást megtalálni.

Amikor nematikus állapotú folyadékkristály anyag két párhuzamos kapilláris üveglap között laminárisan áramlik, akkor az anyag direktora és az áramlás iránya között levő θ szög

$$\operatorname{tg}^2 \theta = \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{\gamma_1 - \gamma_2} \quad (62)$$

kapcsolatba hozható a viszkozításokkal [Dg74]. Itt γ_1 a direktor elfordulásához tartozó ún. csavarviszkozitási együttható és γ_2 az áramlás irányára merőlegesen álló, és az áramlás irányában álló direktorú anyag viszkozitásának különbsége. Helfrich [He69] kimutatta, hogy $\operatorname{tg}^2 \theta = -r^2/c^2$, ahol r a molekula fél rövid, illetve c a fél hossz tengelye. Foster [Fo74] a rendezettség hatását is figyelembe véve azt találta, hogy

$$\operatorname{tg}^2 \theta = \frac{\alpha - S_\theta}{\alpha + 2S_\theta}, \quad (63)$$

ahol

$$\alpha = \frac{I_l + 2I_t}{I_l - I_t}. \quad (64)$$

Itt I_t , ill. I_l a molekula hosszirányú, illetve a rá merőleges irányú tehetetlenségi

nyomatéka ($S_0=1$ esetében Helfrich eredményét kapjuk). Ez az összefüggés is molekuláris és makroszkopikus paramétereket kapcsol össze, kísérletileg csak egy-két anyagra, egy-egy hőmérsékleten ellenőrizték, elég jó eredményeket kaptak.

A dielektromos jelenségek vizsgálatánál már régóta vizsgálat tárgyát képezi a mikroszkopikus τ' relaxációs idő és a dielektromos relaxációs vizsgálatok során mért τ relaxációs idő kapcsolata. Debye erre a (14) formulával megadott

$$\tau = \frac{\varepsilon_0 + 2}{\varepsilon_\infty + 2} \tau' \quad (14)$$

összefüggést vezette be. Más kifejezések is találhatók a dielektromos tulajdonságok vizsgálatával foglalkozó könyvekben [Hi69], de ezek alig különböznek egymástól.

Dielektromos méréseink alapján a $\frac{\varepsilon_0 + 2}{\varepsilon_\infty + 2}$ tényezőt meghatároztam, így OCB-nél 2,8-at, NPOOB-nél 3,6-ot és a hőmérséklettől lényegében független értékeket kaptam. Ebből azt a következtetést vontam le, hogy a rövid tengely körül történő elfordulásoknál a mikroszkopikus relaxációs idő 2—4-es szorzótényezővel leírható kapcsolatban van a megfelelő dielektromos relaxációs idővel.

Az előző fejezetben ismertetett dielektromos relaxációs vizsgálataink után kézenfekvőnek adódott, hogy összehasonlítsuk a molekulák rövid tengelye körül történő elfordulásával értelmezett dielektromos relaxációs időt, a csavarviszkozitás segítségével a (61) formula alapján számolt relaxációs idővel. Ehhez azt is figyelembe tudtuk venni, hogy Perrin [Pe34] a molekulák alakjának figyelembevételével is megadta a (61) összefüggést. Eszerint a molekula rövid tengelye körül történő elfordulásaihoz tartozó relaxációs idő a

$$\tau = \frac{\xi}{2kT}, \quad (65)$$

$$\xi = \begin{cases} 8\pi \gamma_1 a^3 & \text{gömbre} \\ 8\pi \gamma_1 c^3 f\left(\frac{c}{r}\right) & \text{ellipsziszre} \end{cases} \quad (66)$$

összefüggéssel számolható. (Perrinnél természetesen γ_1 helyett a folyadék η viszkozitása szerepelt.) Itt c a molekula fél hossz tengelye, r a forgási ellipszoid forgási sugara, a a gömb sugara, és

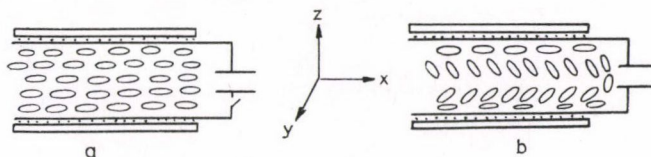
$$f(x) = \frac{1-x^4}{\frac{2-x^2}{\sqrt{1-x^2}} \ln \frac{1+\sqrt{1-x^2}}{x} - 1} \approx \frac{2}{3} \frac{1}{2 \ln \frac{1+\sqrt{1-x^2}}{x} - 1} \quad (67)$$

Perrin-tényező.

Az előző fejezetben megadott relaxációs idők mellé meg kell mérnünk néhány anyagon a γ_1 viszkozitást, kiszámítani a (66) formula alapján a τ relaxációs időt és ezt a dielektromos vizsgálataink során mért alacsony frekvenciás relaxációs idővel összehasonlítani. Most e téren elért eredményeimet mutatom be.

4.1. A csavar vagy feszítési viszkozitás mérése [12]

Helyezzük a nematikus folyadékkristály anyagainkat SnO_2 vezető réteggel bevont transzparens üveglemezek közé. A cella belső felületének megfelelő előkezelésével (l. IV. fejezetet) rendezzük a molekulákat az üveg felületével párhuzamosan, ahogy ezt a 29.a. ábrán bemutatom.



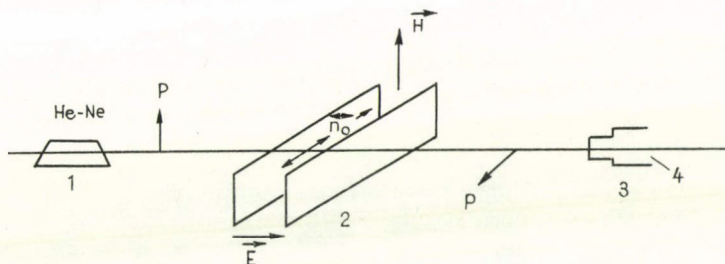
29. ábra. A molekulák elhelyezkedése a cellákban

a) — elektromos tér nélkül;

b) — az elektromos tér rákapcsolása után

A molekulák kezdetben az x tengely irányában állnak. Kapcsoljunk elektromos teret a z tengely irányába a cellára. Ha pozitív dielektromos anizotrópiájú anyaggal töltöttük fel, akkor a direktor (legalábbis a cella közepén) a z tengely irányába kezd beállni (b. ábra). Helyezzük ezt a cellát a 30. ábrán látható optikai mérőberendezésbe.

Elektromos térrel vezérelhetjük a molekulák elfordulási szögét, illetve a cellán áthaladó fény kettőtörését, azaz az ordinárius és extra ordinárius sugár fáziskülönbségét. A feszültség növelésével a cellán áthaladó fény z iránya és a folyadék-



30. ábra. A mérés összeállítása optikai vizsgálatoknál.

1 — lézer fényforrás; P — polarizátor; 2 — mintatartó termosztátóban;

3 — fotomultiplier; 4 — x-y író

kristály optikai tengelye által bezárt szög folyamatosan változik 90° -tól 0° -ig. Keresztezett polarizátorok elrendezésben a kettőtörést szenvedett fény interferál és a detektor

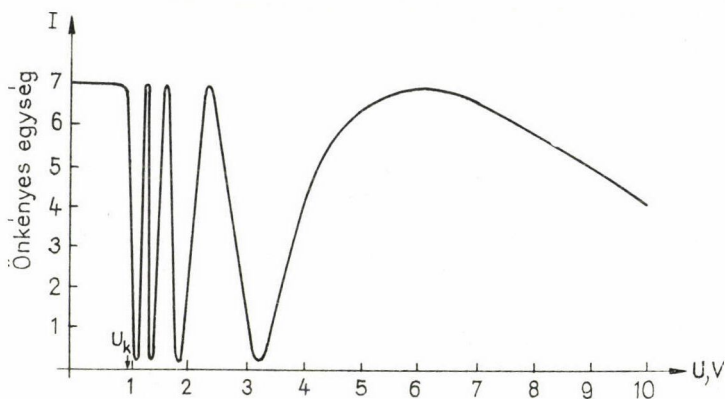
$$J = J_0 \sin^2 2\varphi \sin^2 \Delta\Phi/2 \quad (68)$$

összefüggés szerint [So72] J intenzitást észlel. J_0 a beeső fény intenzitása, $\Delta\Phi$ — az ordinárius és extra ordinárius fénynyaláb fáziskülönbsége, φ a mintára eső fény elektromos vektora és az x tengely által bezárt szög; $\varphi=45^\circ$ a mérések során. A detektorban a mintára kapcsolt feszültség függvényében a 31. ábrán látható intenzitásváltozást tapasztaljuk.

A maximumok és a minimumok helyének analizálásával a molekulák elfordulási szöge meghatározható [21], [23]. Jelenleg elégséges arra figyelni, hogy az intenzitás csak egy bizonyos U_k küszöb feszültség után kezd változni. Ez a küszöb feszültség a folyadékkristályok rugalmassági elmélete alapján meghatározható [5], [Dg74] és

$$U_k = \pi \sqrt{\frac{K_{11}}{\epsilon_a \epsilon_0}} \quad (69)$$

összefüggéssel megadható. Itt K_{11} a feszítési vagy nyitási rugalmas állandó, mely jelentése a 29. ábra alapján érzékelhető. ϵ_0 a vákuum dielektromos állandója. Az



31. ábra. A fényintenzitás változása elektromosan vezérelt kettőstörésknél a feszültség függvényében

első, amit a küszöbfeszültségek mérése alapján megállapíthatunk — tehát a K_{11} rugalmas állandó. Példaként DBAB-n mért rugalmas állandó hőmérséklet függését a 32. ábrán bemutatom.

A molekulák a cella falához erősen kötődnek, olyannyira, hogy a feszültség lekapcsolása után a cellában az eredeti állapot áll vissza. Ha a feszültség rákapcsolásakor csak kis deformációt hozunk létre, akkor a feszültség kikapcsolása után a molekulák elfordulási szöge exponenciális függvény szerint változik az idővel:

$$\vartheta(t) = \vartheta(0) e^{-\frac{t}{t_d}}. \quad (70)$$

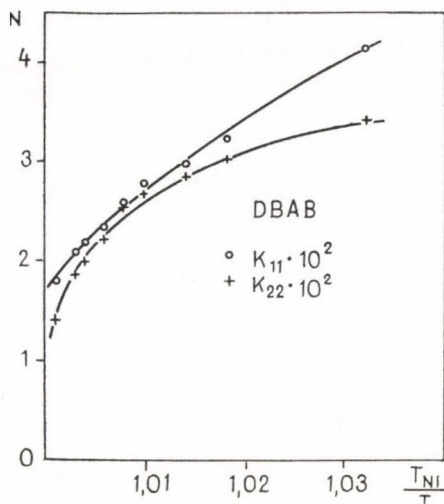
Egyszerűen kimutatható, hogy [Dg74] L vastagságú cellában

$$t_d = \frac{\gamma_1 L^2}{\pi^2 K_{11}} \quad (71)$$

összefüggés adható meg. Láthatjuk tehát, hogy t_d és U_k mérésével a γ_1 csavarviszkozitás, illetve itt talán célszerűbb lenne feszítési viszkozitásnak hívni — meghatározható. Negatív elektromos anizotrópiájú anyagoknál elektromos tér helyett mágneses teret alkalmazunk. Ha a 30. ábrán látható berendezésnél a cellát y tengely irányába mutató H mágneses térbe helyezzük, akkor a mágneses tér a molekulákat az y tengely irányába csavarja, csavardeformációt hoz létre. Merve a cellán áthaladó

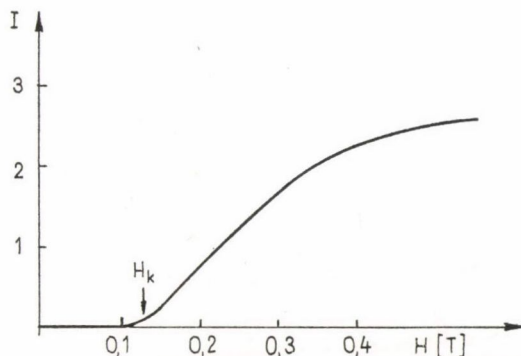
fény intenzitását a mágneses tér függvényében a 33. ábrán látható intenzitásfüggést tapasztaljuk.

Kimutatható, hogy a H_k küszöbfeszültség



32. ábra. A rugalmas állandók hőmérsékletfüggése DBAB-n

$$H_k = \frac{\pi}{L} \sqrt{\frac{K_{22}}{\mu_0 \chi_a}} \quad (72)$$



33. ábra. A fényintenzitás változás a mágneses tér függvényében

kapcsolatban van a K_{22} csavardeformáció rugalmas állandójával. χ_a a szuszceptibilitás anizotrópiája. A mágneses tér kikapcsolásakor, kis deformáció esetén (az $I(H)$ görte lineáris szakasza) az áthaladó fény intenzitása exponenciálisan cseng le. Ilyen időfüggést a 34. ábrán mutatunk be. Jelen esetben

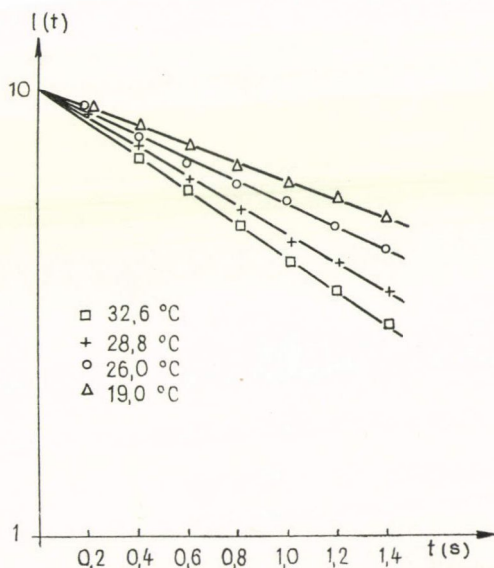
$$t_d = \frac{\gamma_1 L^2}{2K_{22} \pi^2} \quad (73)$$

t_d és H_k mérésével, χ_a ismeretében γ_1 ismét meghatározható.

A mért viszkozitásokat a hőmérséklet függvényében a 35. ábrán mutatom be.

A csavar, illetve feszítési viszkozitás méréseinkből megállapítható, hogy

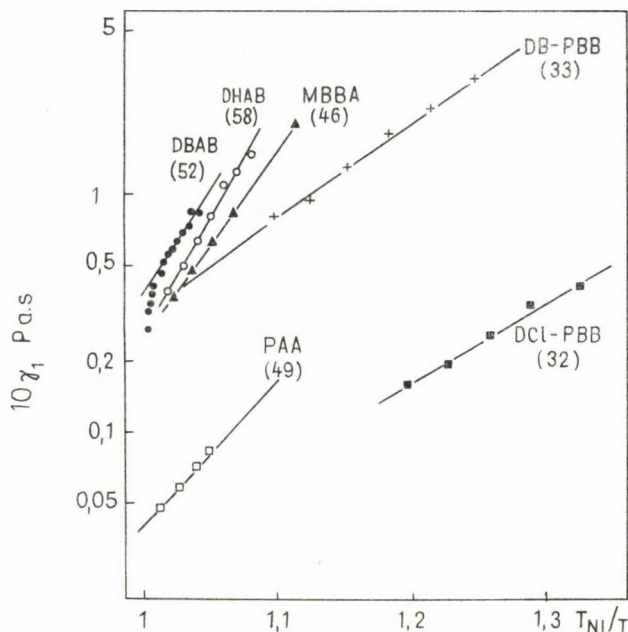
— A hőmérséklet reciprokának függvényében exponenciális függvény szerint változnak egészen a nematikus-



34. ábra. A fény intenzitás változása az idők függvényében a mágneses tér lekapcsolása után néhány rögzített hőmérsékleten.

izotrop folyadék fázisátmeneti pont környezetéig, ott eltérés figyelhető meg. Zárójelekben megadtam a lineáris szakaszból megállapított aktiválási energiákat.

— Az aktiválási energiák két-, illetve három benzolgyűrűs anyagoknál is egymás között megegyeznek. Két benzolgyűrűs anyagokra 53 kJ/mol, három benzolgyűrűs anyagokra 32 kJ/mol adható meg.



35. ábra. A feszítési és csavar viszkozitások a reciproknak redukált hőmérséklet, T_{NI}/T függvényében, néhány nematikus folyadékkristály anyagnál. Zárójelben az aktiválási energiák.

— Meglepő az az eredmény, hogy a fázisátmeneti pontra, $T_{NI}/T \rightarrow 1$ extrapolált viszkozitási adatok megegyeznek, ha a molekula mindkét végén dipól (PAA és DCI-PBB) helyezkedik el és egyéb esetekben. (Dipól nélkül, vagy csak az egyik végén dipóllal.)

— Azoknál az anyagoknál, melyeknél a végeken dipól van, a feszítési, illetve csavarviszkozitás egy nagyságrenddel kisebb, mint a többi anyagnál.

4.2. A relaxációs idők összehasonlítása

Az általunk vizsgált anyagoknál a γ_1 viszkozitások segítségével az (56) formula alapján kiszámítottam a rotációs relaxációs időket. A molekulák geometriai méreteit EUGON-modellek segítségével állapítottam meg. Az V. táblázatban megadom a vizsgált anyagokat, a molekulák geometriai méreteit, a Perrin-tényezőket, a viszkozitást, a számolt és a dielektromos mérésekkel megállapított relaxációs időket egy-egy véletlenül kiválasztott hőmérsékleten.

V. TÁBLÁZAT

Anyagok	c	r	$f(x)$	TK	γ_1	$\tau_\gamma \cdot 10^8$ s	$\tau \cdot 10^8$ s
MBBA	10	3,1	0,25	295	1,25	9,6	14,5
PAA	8,9	2,9	0,26	398	0,06	0,25	0,4
DBAB	11	3,1	0,23	299	0,57	5,38	4,2
DHAB	13,5	3	0,20	315	0,64	9,1	10
DB-PBB	14,5	3,2	0,20	397	1,3	18	28
DCI-PBB	11,3	3,2	0,23	408	0,263	1,94	30

A VI. táblázatból megállapíthatjuk, hogy a két relaxációs idő, τ_γ és τ meglepően jól egyezik az első öt anyagra, csak a DCI-PBB esetében van jelentős (egy nagyságrend) eltérés. Felületes szemlélet szerint éppen ennél az anyagnál kellene a legjobb egyezést várni, hiszen ez a molekula tekinthető a legmerevebbnek, — a végek mozgékonyága nem zavarja a molekula „testszerű” mozgását. Ezt az eltérést nem magyarázhatjuk azzal, hogy a végeken dipól van, hiszen PAA esetében nem talákoztunk ezzel a problémával. Az eltérést abban keressük, hogy a CI elektromos töltést alakít ki a molekulák végein és az egymás mellett levő molekulák itt taszítják egymást, tehát a DCI-PBB molekulák nem elektromosan semleges környezetben mozognak, mint a többi molekula.

A feszítési- és csavarviszkózitás, illetve az alacsony frekvenciás dielektromos relaxációs idő összehasonlításából megállapíthatjuk, hogy

— mindkettő csak nematikus állapotban figyelhető meg, izotrop folyadék-állapotban eltűnnek;

— mindkettő hasonló hőmérsékletfüggést mutat, hasonlóan térnek el a fázisátmeneti ponthoz közeledve;

— az aktiválási energiák két benzolgyűrűs anyagokra közel megegyeznek, illetve az eltérés 10 kJ/mol;

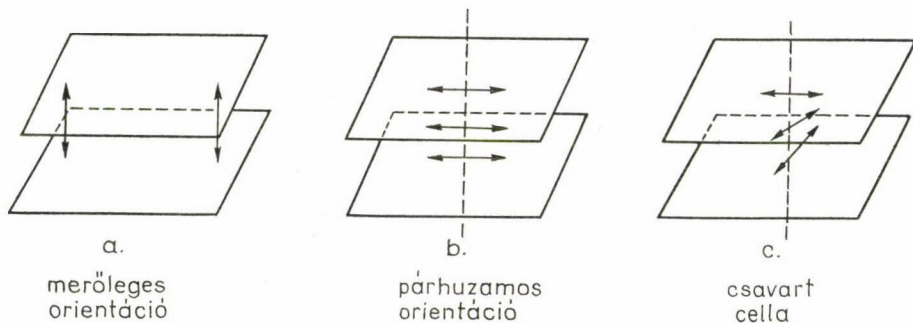
— a három benzolgyűrűs anyagokon mért aktiválási energiák között az eltérés igen nagy, 30 kJ/mol.

Az aktiválási energiákban mutatkozó eltéréseket mindenekelőtt a két jelenség között levő különbségtől kell keresni. A dielektromos relaxáció ugyanis molekuláris szempontból egyedi, a viszkozitás kollektív folyamat. A dielektromos relaxációnál a molekulák egyedenként fordulnak el, a feszítési viszkozitás mérésénél a direktor fordul el, azaz a falhoz közellevő molekula visszafordul eredeti helyére és lyukat hagy maga után, melybe a szomszédos molekula könnyebben befordulhat. Ha erre a lyukmozgásra 10 kJ/mol-t számolunk, akkor a háromgyűrűs molekuláknál tapasztalt további 20 kJ/mol eltérés értelmezéséhez csak azt kell feltennünk, hogy ezek a molekulák hossz tengelyük körül nem fordulnak el, amikor a viszkozitásmérés folyik. Az előző fejezetben ugyanis azt állapítottuk meg, hogy ehhez az elforduláshoz 14 kJ/mol tartozik.

IV. A FOLYADÉKKRISTÁLYOK GYAKORLATI ALKALMAZÁSAIÉRT

A folyadékkristályok gyakorlati felhasználásuk során két területen már kétség nélkül hódítanak. Az egyik az elektro-optikai jelenségek hasznosítása kijelzőkben, a másik terület a hőmérsékletérzékeny filmek termográfiai alkalmazása. A kutatásaink indításától mindkét vonalat figyelemmel kísérjük, bár a végzett munkánk nem egyenlő mértékben oszlik meg a két terület között. Elkezdtük a folyadékkristályos anyagok szintetizálását és ma már mintegy ötven sajátkészítésű anyaggal rendelkezünk. A következő feladatnak a rendezett folyadékkristály-rétegek előállítása bizonyult. Rendezett folyadékkristály minta szükségeltetik a fizikai vizsgálatokhoz és a folyadékkristály gyakorlati használhatóságát bizonyító elektro-optikai eszközök elkészítéséhez. A rendezett anyagminta hasznosságának szerepét a fizikai vizsgálatoknál már láttuk az előző fejezetekben. A kijelzők készítéséhez szükséges rendezett folyadékkristály-rétegek előállításának kérdései nem különböznek az elektro-optikai vizsgálatokhoz szükséges minták előállításának problémáitól, de magasabb követelményeket támasztanak. Az anyagismeret kérdései is élesen jelentkeznek az eszközök készítésénél. A kijelzők készítése során szerzett tapasztalataink bizonyultak igen hasznosaknak a fizikai vizsgálatok során. Az anyagismeret és a mintakészítéssel összefüggő kérdéseket ezért itt a kijelzők készítésével együtt mutatom be.

Mind a fizikai vizsgálatoknál, mind a kijelzők készítésénél általában három makroszkopikusan rendezett anyagminta valamelyikén kezdjük el a vizsgálatokat. Ezt a három rendezési helyzetet a 36. ábrán mutatom be.



36. ábra. Rendezett folyadékkristály rétegek típusai

Az *a*) típusú cellánál a molekulák hossz tengelye (pontosabban a direktora) mindkét falra merőleges; a

b) elrendeződésnél a molekulák a fallal párhuzamosan, egy irányba állnak be; a

c) cellában a molekulák a falak mentén a fal síkjában egymással párhuzamosak, de az alsó és a felső falnál egymáshoz képest 90° -os szöget zárnak be, a cella belsejében pedig fokozatosan elfordulnak. Ezt a cellát nevezzük csavart nematikus cellának.

1. Kijelző cellák előállítása

Megbízható működésű, jó kontraszt hatású, hosszú élettartamú kijelzők elkészítéséhez számos technológiai probléma megoldása szükséges. Ezek közé tartoznak a hordozó üvegfelületek kiválasztása és megmunkálása, illetve előkészítése, a cella lezárása és a megfelelő élettartamú anyagok kikísérletezése.

Fontos, hogy a felhasználandó üveglapok karc- és hibamentes felülettel rendelkezzenek. Kísérleti celláinkhoz hazai gyártmányú táblaüveget, belga tükörüveget és Nessatron üvegeket használtunk, ezek felületi minősége megfelelőnek bizonyult.

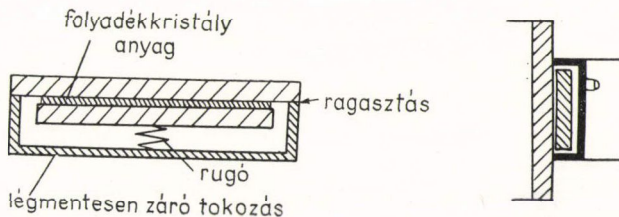
A kiválasztott üveglapok felületére megfelelő optikai tulajdonságú SnO_2 vezető réteget vittünk fel. A vezető rétegeken a szükséges ábrákat fotolitografikus eljárással, maszkolással alakítottuk ki. Reflexiós típusú celláknál a hátsó elektródát vákuum párologtatással készítettük „hat-kilences” tisztaságú alumíniumból.

A megfelelően kialakított elektródákkal ellátott üveghordozóra a folyadékkristályokat orientáló réteget vittünk fel. Erre a célra a lecitint alkalmasnak találtuk, amelyet kb. 1%-os vizes oldatból bemártással vittünk fel a felületre. Az így előkészített réteg biztosította egyes folyadékkristályos anyagok felületre merőleges elrendeződését. Hasonló eredményre vezetnek a felületen sziloxán kötással kötődő trimetoxi szilán típusú vegyületek is. Ezek az anyagok a felvitelt követő hőkezelés során polimerizálódnak és a felületen stabil kétdimenziós rácsot alkotnak.

Jó minőségű és reprodukálható előállítható orientáló hatást érhetünk el a vezető felületére történő vékony (2–5 nm) rétegű ferde vákuumpárologtatással, erre alkalmas fémek vagy fémoxidok (Pt, Au, Sn, Pb, Al, Cu, Ag, Cr, SiO stb.) segítségével.

Amíg a rövid optikai kísérleteknél a cellák lezárása nem okoz különösebb gondot, a gyakorlati hasznosításba kerülő kijelzőnél annál nagyobb feladatot jelent. A hőmérsékletváltozások hatására az anyagok nem egyformán tágulnak, így a cellában mikropedések keletkezhetnek, melyeken keresztül a folyadékkristály-anyag kiszökik vagy elszennyeződik. Mi kétféle lezárást próbáltunk ki. Az egyik cellatípusnál, melynek sematikus rajzát a 37. ábrán mutatom be, a hőtágulás hatását olyan módon kerüljük meg, hogy a cellát a folyadékkristály-anyagtól távol zárjuk le. A folyadékkristály-anyagot a kapilláris erők tartják az elektródák között. Ennek a megoldásnak a legnagyobb hátránya, hogy csak reflexiós típusú kijelző készíthet ily módon.

További vizsgálatok céljára létrehoztunk közvetlenül ragasztott cellát is. A cella felületét, vastagságát, az üveglemezek vastagságát úgy választottuk meg, hogy a hőmérsékletváltozás hatására fellépő folyadéknnyomás ne okozzon repedéseket. Olyan



37. ábra. Reflexiós folyadékkristály cella felépítése

ragasztóanyag, melyet a folyadékkristály-anyag nem old, a kétkomponensű epoxigyanta bizonyult. A vizsgált nematikus folyadékkristály-anyagok az Epotek-H töltőanyag-nélküli típusából teljesen kikeményedett állapotukban nem oldottak ki zavaró anyagot.

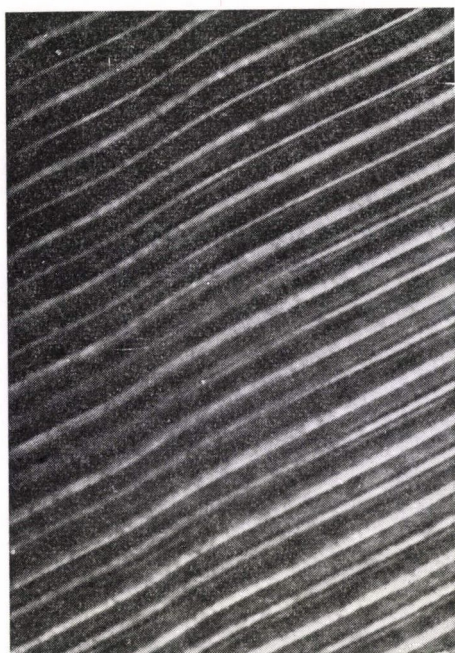
2. A kijelzőkben használatos effektusok vizsgálata

A folyadékkristály kijelzőkben hasznosítható legjelentősebb három effektust vizsgáltuk: az elektromosan vezérelt kettős törést, a csavart nematikus cella elektromos vezérlését és a dinamikus szórását.

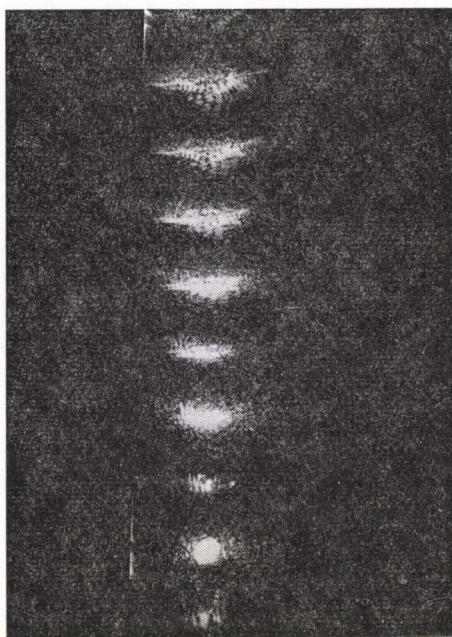
Az elektromosan vezérelt kettőstörés jelenségét a III. 4.1. pontban már bemutattam. Pozitív dielektromos anizotrópiájú folyadékkristály-anyag esetén a cellában a molekulák *b*) típusú, negatív dielektromos anyagok esetében *a*) típusú elrendeződését valósítjuk meg. A kijelzőn a 31. ábrán látható küszöbfeszültség néhányszorosát kapcsoljuk a cellára. Az elektromos kettőstörés jelenségét a nematikus anyagok rugalmassági elmélete alapján részletesen vizsgáltuk [23], [21]. Az irodalomban ismert leírásokat pontosabbá tettük azáltal, hogy figyelembe vettük az alkalmazott tér módosulását a minta belsejében. Ezzel sikerült pontosabb egyezést kapni a kísérleteinkkel és megmagyarázni a kettőstörés függését az alkalmazott feszültség frekvenciájától.

A csavart nematikus cella alapállapotában a rajta áthaladó fény polarizációját 90° -kal elforgatja. Így keresztezett polarizátorok között a cella a fényt teljesen átengedi és a cella a világos, párhuzamos polarizátorok között pedig fekete. Az elektromos tér a pozitív dielektromos anizotrópiájú anyag molekuláit a tér irányába fordítja, így a folyadékkristály-réteg a fény polarizációját már nem forgathatja el és a kezdetben fekete cella világos, a világos cella sötét lesz. Készítettünk ezen az elven működő kijelzőt. A jelenség fizikai vizsgálata során munkatársaim új módszert dolgoztak ki a rugalmas állandók mérésére [Bu76].

A dinamikus szórás jelenségének felfedezése [Wi63] hívta fel a figyelmet a folyadékkristályok alkalmazhatóságára kijelzőkben. Negatív elektromos anizotrópiájú anyag *a*) vagy *b*) típusú cellában néhány volt feszültség hatására tejfehérré válik, erősen szórja a fénysugarakat. Fizikailag érdekes jelenségek figyelhetők meg pár voltos küszöbfeszültség hatására. A folyadékkristály-rétegben a 38.a. ábrán látható szabályos örvényszálak figyelhetők meg, ezek ún. Williams-domének. Lézerfényrel a 38.b. ábrán látható fénydiffrakció figyelhető meg. Tovább növelve a feszültséget, az örvénysorban a hibahelyek száma egyre növekszik és végül a 39.a. ábrán látható kétdimenziós szerkezet alakul ki, melyen a 39.b. ábrán látható fénydiffrakció hozható létre [22]. 20–30 V-os feszültség hatására ezek a szerkezetek eltűnnek és a cella erősen szórja a fénysugarakat. Megfigyeltük az itt bemutatott szerkezeteket, továbbá azt, hogy az örvények kialakulásához egyre növekvő feszültség szükséges, ha az elektromos tér frekvenciáját növeljük. A dinamikus szórás matematikai tárgyalása még kevésbé kidolgozott, mint az előbb említett két effektusé. Méréseink alapján hazánkban *Pataki* [Pa75] kezdett a kérdéssel elméletileg és egyik munkatársunk [Já76], [Gu77] kísérletileg foglalkozni. Az örvénysorok kialakulását *Helfrichnek* [He69] sikerült megmagyaráznia a nematikus anyagok hidrodinamikája alapján, rámutatva az anyagban levő ionok döntő szerepére. Nagy tisztaságú ionmentes anyagokban



a)

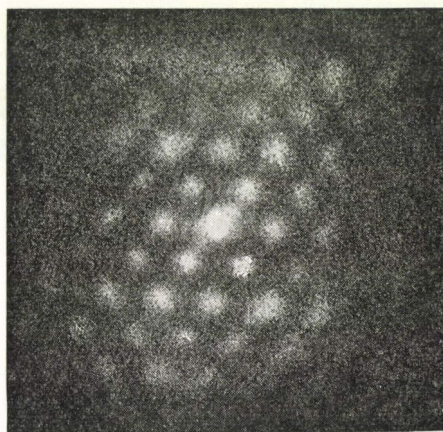


b)

38. ábra. A Williams domének képe polarizációs mikroszkópban (a) és a rajtuk készített lézertény diffrakció (b)



a)

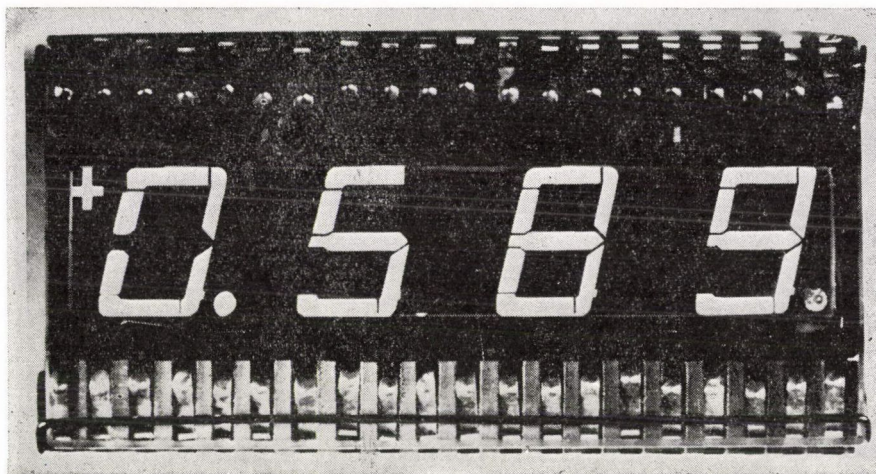


b)

39. ábra. A Williams domének felszakadása (a) és a róluk készített fénydiffrakció (b)

a jelenség valóban nem lép fel. A jelenség megfordítása is igen jelentős. Nem kellően ionmentesített negatív dielektromos anizotrópiájú anyagok elektromos térrel nem rendezhetők, mert tennük fellép a dinamikus szórás jelensége. Ennek az effektusnak az ismeretének hiánya vezetett számos hibás fizikai mérés elvégzéséhez.

A kijelzőkben lejátszódó tranziens folyamatokat (a feszültség be-, illetve kikapcsolása) a III. 4.1. pontban lényegében vizsgáltuk. A (71), (73) formulákból is látható, de általánosítható is, hogy a fel- és lefutási időket egyrészt az anyagi paraméterek, mint a viszkozitás, rugalmas állandók, dielektromos anizotrópia, másrészt a cella vastagsága, valamint az elektromos kapcsolási módok határozzák meg.



a)



b)

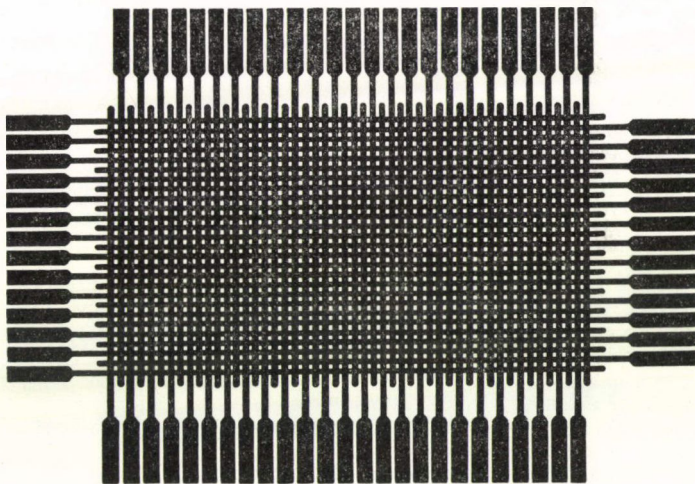
40. ábra. A hételemes kijelzőnkel kiírt számok és a 14 elemes kijelzőnkel kiírt betűk és számok

A kijelzőkben létrehozott effektusok időbeli lefutását meggyorsíthatjuk pl. úgy, hogy a tér kikapcsolásával egyidejűleg olyan teret kapcsolunk a cellára, melynek frekvenciája nagyobb a folyadékkristály-anyag dielektromos relaxációjának frekvenciájánál. Ezeket a jelenségeket itt nem részletezzük, de az általunk végzett fizikai vizsgálatok a jelenségek fizikai hátterét alkotják.

3. A készített kijelző típusok

Mi három kijelző típust készítettünk: hételemes, alfa-numerikus és mátrix kijelzőt, transzmissziós és reflexiós kivitelben. A felhasznált fizikai effektusok a dinamikus szórás és a csavart nematikus szerkezet elektromos vezérlése volt. A hételemes és az alfa-numerikus kijelző szerkezeti felépítése a 37. ábrán bemutatottal egyezett meg. A hételemes kijelzők fényképe, vele kiírt számmal a 40.a. ábrán, az alfa-numerikus 14 elemes kijelző segítségével kiírt szöveg és szám a 40.b. ábrán látható.

A 27×50 elemes mátrix kijelzőnk elektródáinak alakját és elhelyezését a 41. ábrán láthatjuk. Ezt a cellát csak transzmissziós kivitelben készítettük el. Az első lapon az x , a hátsó lapon az y koordináták szerepelnek.



41. ábra. 27×50 -es mátrix kijelző elektródáinak elhelyezkedése

4. Az ipari és a mezőgazdasági hasznosítás perspektívái

A bevezetőben ismertetett hazai együttműködésünk arra vezetett, hogy ma már megteremtődtek a folyadékkristályok gyakorlati hasznosításának feltételei hazánkban.

A kijelzők létrehozása területén az együttműködési megállapodásunk alapján a KFKI biztosítja a szükséges alap kutatásokat (a kijelzősmódok és a felhasználható anyagok vizsgálatát), a HIKI a gyártmányfejlesztést (technológiai előkísérleteket),

a REMIX a gyártásfejlesztést és a gyártó bázist. A szükséges beruházásokhoz az anyagi feltételek biztosítottak látszanak.

A hőmérséklet-érzékeny filmek és az alkotó anyagminták kemérését a KFKI, a gyártást és a forgalombahozást a REANAL végzi. A készített folyadékkristály-filmek orvosi, állatorvosi és kriminalisztikai kipróbálására széles körű együttműködés alakult ki a Dabasi Állami Kórház, a Dabasi Állatkórház, Szegedi OTE klinikái és a Pestmegyei Rendőrkapitányság közreműködésével. Kapcsolódik a munkához a Gödöllői Agrártudományi Egyetem is.

Kevésbé előrehaladott a liotróp folyadékkristályok vizsgálata során megismert nemzetközi tapasztalatok hazai hasznosítása. A liotróp rendszerek nagy szerepet játszanak biológiai rendszerekben. Az ismeretek hasznosítása orvosi-gyógyászati (pl. érelmeszesedés) munkák kapcsán nagyjelentőségű. Hazánkban egyelőre a megismerés és felismerés stádiumában vagyunk.

V. ÖSSZEFOGLALÁS, TÉZISEK

A. A KITŰZÖTT FELADAT ÉS ELŐZMÉNYEI

A szilárdtestkutatások egyik legfiatalabb és nagy intenzitással művelt ága a szerves molekulák-ból felépülő részben rendezett anyagok fizikája. Ezen belül igen széleskörű érdeklődés nyilvánul meg a folyadékkristályok megismerése és gyakorlati felhasználása iránt.

Már régóta (1888) ismerünk folyadékkristályos tulajdonságot mutató anyagokat, de jelentőségük a gyakorlati hasznosítás és a tudományos kutatások számára csak az elmúlt években vált nyilvánvalóvá. Csak 1964-ben mutattak rá a koleszterikus anyagok alkalmazhatóságára az orvosi és elektronikai stb. vizsgálatok területén. 1968 után figyelt fel az elektronikai ipar arra, hogy folyadékkristályok segítségével integrált áramkörökhöz illeszkedő igen alacsony teljesítmény-igényű kijelzők készíthetők. 1976-ban magyarázták meg a vörös vérttest alakváltozását folyadékkristályokon kidolgozott rugalmassági elmélet alapján. Az érdeklődés az elmúlt évtizedekben jutott olyan szintre, hogy minden évben több nemzetközi konferenciát tartanak és külön folyóirat is megjelenik a témában.

A KFKI vezetősége 1972-ben határozta el a kutatások beindítását ezen a területen. Megbízást kaptam a téma beindításának megtervezésére és kutatási programjának kidolgozására. Ehhez 1972 végén magyarnyelvű jegyzetet tettem közzé [1].

1973–1977 időre az OMFB és a KFKI kutatási fejlesztési szerződést kötött „A folyadékkristály-anyagok kutatása és kijelzők fejlesztése” témára. A téma része lett a Szilárdtestek kutatása főiránynak, az „Elektronikai alkatrészek kutatása-fejlesztése” programnak, mely az Országos Távlati Kutatási tervben K-7 számon kiemelt célprogram.

A téma keretében kettős feladat állt előttünk: egyrészt a folyadékkristály-anyagok és állapot megismeréséhez az anyagkutatást, a folyadékkristályok hazai megismertetését [2–5], másrészt a konkrét gyakorlati felhasználás elősegítésére a megfelelő fizikai jelenségek vizsgálatait és laborpéldányú eszközök elkészítését kellett biztosítanunk.

A gyakorlati alkalmazások elsősorban a nematikus és koleszterikus anyagok vizsgálatait kívánta. A kutatásaink beindításakor a nematikus anyagok szerkezete és a segítségükkel létrehozható elektro-optikai effektusok közül mátt több ismert volt, a molekuladinamikai sajátságok vizsgálata éppen elkezdődött. A dinamikai vizsgálatok során kapott kísérleti eredményeket többnyire egymástól függetlenül és primitíven értelmezték. Célul tűztem ki a molekulák mozgásának meghatározását és olyan leírását, mellyel egységesen értelmezhetem legalább nematikus és szmektikus-A állapotú rendszerekben a dielektromos relaxáció és a rugalmatlan neutronsórás vizsgálata során kapott mérési eredményeinket, továbbá a folyadékkristály kijelzőkben lejátszódó folyamatok tranziens részét.

B. VIZSGÁLATI MÓDSZEREK

Az anyag és a kijelzőkben lejátszódó effektusok vizsgálatához az anyagmintákat általában az intézetünkben szintetizáltuk, majd megállapítottuk az anyagok termodinamikai sajátságait, a fellépő folyadékkristály és szilárd állapotok hőmérséklet intervallumait és a hőmérséklet változtatásának

hatását a kialakuló állapotokra. Ezeket a vizsgálatokat Perkin-Elmer DSC kalométerrel végeztük el. Fűthető-hűthető tárgyasztalú polarizációs mikroszkóppal vizsgáltuk a kialakuló fázisok texturáit.

Ezek közül az anyagok közül választottam ki néhányat részletesebb mikrodinamikai vizsgálatokra olyan szempontok alapján, hogy a vizsgálni kívánt jelenségeket minél tisztábban mutassák. Rendezett anyagmintákat elektromos vagy mágneses térrel és megfelelően kezelt felületek segítségével állítottam elő. Az anyagminták rendezettségét polarizációs mikroszkóppal vagy lézerrel működő elektro-optikai berendezéseinkben ellenőriztem. Ezek a munkák a fizikai vizsgálatok mellett a kijelző készítés előkészítő munkálatai is voltak.

Dielektromos vizsgálatokhoz 0—1,7 Tesla mágneses térrel, 50 Hz—10 MHz frekvencia-tartományban használható mérőberendezést hoztam létre, mellyel a dielektromos állandó reális és imaginárius részét a frekvencia és a hőmérséklet függvényében mérhettem. Átalakítottuk a korábbi repülési idő spektrométerünket korrelációs repülési idő spektrométerre. Ezen a spektrométeren végeztük a rugalmatlan neutronsórás méréseinket.

Lézerből, megfelelően termosztált mintatartóból, goniométerből, multiplierből elektro-optikai vizsgálatokhoz alkalmas mérőberendezést hoztam létre.

A rugalmatlan neutronsórás vizsgálatához fizikai modelleket dolgoztunk ki. Ezek alapján meghatároztam a szórásfüggvényeket és ezeket a kísérletileg mért neutronspektrumokkal összehasonlíttam.

C. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

1. Termodinamikai tulajdonságok és szerkezetek vizsgálata [7]

A fizikai vizsgálatainkhoz kiválasztott anyagmintáink termikus tulajdonságait tanulmányozva megállapítottam a fellepő szilárd és folyadékkristály állapotokat, a fázisátmenetek entalpia és entropia változását. Az oktil-cinao-bifenil, röviden OCB és nitrofenil-oktiloxy-benzoát, röviden NPOOB esetében fellepő nematikus-szmektikus-A fázisátmenetek gyengén elsőrendűeknek, a nematikus-izotrop átmenetek elsőrendűeknek adódtak.

2. Irányrendezettség és dielektromos anizotrópia [8]

A nematikus és szmektikus-A szerkezettel rendelkező OCB és NPOOB, továbbá széles hőmérséklet intervallumban nematikus tulajdonságú keverékek dielektromos tulajdonságait vizsgálva megállapítottam, hogy

— olyan anyagoknál, melyeknél a molekula permanens dipólmomentuma (μ) a molekula hossztengele irányába mutat ($\mu_{\parallel} \gg \mu_{\perp}$) a nematikus-szmektikus-A fázisátmenet során a dielektromos állandó mindkét, a direktor irányába ϵ_{\parallel} és rá merőleges irányba mutató ϵ_{\perp} komponensének értéke ugrásszerűen megváltozik.

— ϵ_{\parallel} és ϵ_{\perp} mindkét anyagnál nematikus szerkezetben nagyobb, mint szmektikus-A szerkezetben. Ez azt mutatja, hogy a molekulák nagyobb számban képeznek antiparalel dipól párokat szmektikus-A állapotban, mint nematikusban.

— Az $\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_{\parallel} + 2\epsilon_{\perp}}{3}$ átlagos dipólmomentum folyadékkristály állapotból izotrop állapotba extrapolált értéke kisebb mint az izotrop állapotban mért érték. Ez arra utal, hogy nematikus állapotban a molekulák nagyobb számban képeznek antiparalel párokat mint izotrop állapotban. Így levonható az a következtetés, hogy

- a hőmérséklet csökkenésével a fázisátmenetek során a molekulák ugrásszerűen növekvő számban állnak be antiparalel párokba, továbbá
- a dielektromos anizotrópia szmektikus-A szerkezetenél — szemben a nematikus szerkezetenél tapasztalattal — nem lehet arányos az orientációs rendparaméterrel.

3. MOLEKULADINAMIKAI VIZSGÁLATOK

A nematikus és szmektikus-A anyagok optikailag egytengelyűek és hengersizmetriát mutatnak. A molekulák legsajátosabb mozgása a direktorhoz (optikai tengelyhez) viszonyított elfordulás és a direktor körüli bolyongás.

a) Dielektromos relaxációs vizsgálataink alapján megállapítottam, hogy

— olyan keverékeknél, melyben a komponensek eléggé különböznek egymástól, a relaxációs idők szétválaszthatók, a relaxációs idők Cole-Cole eloszlás függvényrel jellemezhetők [9, 10].

— Egykomponensű anyagokban nematikus állapotban a dielektromos relaxációs idő hőmérsékletfüggését jellemző aktiválási energiák elég jól egyeznek egymással, de a három benzolgyűrűs anyagoknál mintegy 9 kJ/mol-al nagyobbak adódnak, mint két benzolgyűrűs anyagoknál [12].

— A relaxációs idők nematikus-izotrop fázisátmeneti pontra extrapolált értékei aszerint esnek elég közel egymáshoz, hogy a molekula mindkét végén van-e, vagy legalább egyik végén nincs dipól [12].

Vizsgáltam a molekula rövid tengelye körül történő elfordulásához tartozó relaxációs időt a nematikus-szmeztikus-A és a nematikus-izotrop fázisátmenetek környezetében és megállapítottam, hogy

— a relaxációs idők eloszlás függvényének alakja nem változik meg a fázisátmenetek során [8].

— A molekula rövid tengelye körül történő elfordulásához tartozó relaxációs idő törést szenved a gyengén elsőrendű nematikus-szmeztikus-A fázisátmenetnél [8]. Az aktiválási energiák a két fázisban különböznek.

— A nematikus-izotrop folyadék fázisátmenet felé közeledve (valószínűleg olyan anyagoknál, melynél $\mu_e > \mu_1$), a dielektromos relaxációs időben az exponenciális viselkedéstől eltérés (lehajlás) figyelhető meg [12].

b) A rugalmatlan neutronszerzés segítségével mért spektrumok értelmezéséhez először új modellt javasoltam: a bolyongás körpályán modell [15], majd ennek hibáit látva javaslatomra új modellt dolgoztunk ki: bolyongás gömbfelületen két különböző relaxációs idővel modell [17].

A sztochasztikus repülési idő neutronspektrométerünkön PAA és DB-PBB és DL-PBB rendezett és rendezetlen anyagmintákon végeztünk méréseket [13–18].

Megállapítottam, hogy a rendezetlen mintán mért spektrumok jól illeszkednek a bolyongás körpályán modellel számolt spektrumokkal, így a molekula direktor körül történő bolyongásnak relaxációs ideje meghatározható. Meghatároztam a relaxációs időt különböző hőmérsékleteken.

Kimutattam, hogy a rendezett mintán végzett méréseink és a bolyongás körpályán modellel számolt spektrumok között észlelt eltéréseket nem értelmezhetjük csupán a molekula végein lévő gyökök mozgásának hatásával, hanem a molekula mozgásának leírására az általunk kidolgozott bolyongás gömbfelületen két relaxációs idővel modellt kell alkalmazni. A bolyongás gömbfelületen modellünk segítségével kimutattam, hogy

— nematikus szerkezetben a molekulák billegő sztochasztikus bolyongást végeznek a direktor körül. Ez a mozgás egyszerűen a direktor körül körpályán bolyongásból, másrészt a direktor irányához viszonyított billegéssből tevődik össze. Megadtam mindkét mozgás relaxációs idejét és aktiválási energiáját [19–21].

c) Különböző vizsgálati módszerekkel kapott eredmények összekapcsolása terén — a billegő-forgó mozgás alapján — új értelmezést adtam a nagyfrekvenciás dielektromos diszperziós mérése során tapasztalt relaxációs folyamatoknak. A kiegészített diffúziós egyenlet alapján a kísérletekkel egyezően írtam le a relaxációs folyamatokat. Ezzel a neutronspektroszkópia és dielektromos diszperzió segítségével mért hatásokat egységesen értelmeztem.

Több nematikus szerkezetű anyagon kimértük a feszítési viszkozitást a hőmérséklet függvényében és megállapítottam, hogy

— a feszítési viszkozitás exponenciális függvény szerint változik a nematikus-izotrop fázisátmenet környezetéig, a fázisátmenethez közeledve a dielektromos relaxációs idő hőmérséklet függésénél tapasztalt eltérés figyelhető meg [12].

— Az exponenciális szakaszból megállapított aktiválási energiák két-, illetve három benzolgyűrűs anyagra megegyeztek, 53 kJ/mol, illetve 32 kJ/mol-nak adódtak.

— A fázisátmeneti pontra extrapolált $T_{NI}/T \rightarrow 1$ viszkozitások értékei — a dielektromos relaxációs idők viselkedéséhez hasonlóan — aszerint egyeztek meg, hogy a molekula mindkét végén dipól helyezkedik el, vagy legalább az egyik végén nincs dipól.

A forgó mozgásokra bevezetett rotációs diffúziós formula alapján a mért feszítési viszkozitások segítségével kiszámoltam a molekula rövid tengelye körül történő elforduláshoz tartozó relaxációs időket és összehasonlítottam a dielektromos mérések alapján megállapított relaxációs időkkel. Az összehasonlítás azt mutatta, hogy

— mindkét relaxációs idő hasonló hőmérsékletfüggéssel rendelkezik, és hasonlóan térnek el a fázisátmenet hőmérsékletéhez közeledve.

— Az aktiválási energiák két benzolgyűrűs anyagoknál egymással egyezőknek, a három benzolgyűrűs anyagoknál már kissé eltérőknek adódtak.

— A kétféle relaxációs időre kapott adatok abszolút értékei is elég jól egyeztek. Kivételt csak egy anyag, a DCI-PBB képezett, melynél az eltérést a molekula mindkét végén lévő elektromos töltés okozhatja.

I. AZ ÉRTEKEZÉS TÉMAKÖRÉBŐL KÉSZÜLT PUBLIKÁCIÓK

1. Bata L.: Folyadékkristályok. KFKI—72—7495.
2. Bata L.: Folyadékkristályok a gyakorlatban, 1972. KFKI.
3. Bata L.: Folyadékkristályok fizikai, biológiai rendszerekben és a gyakorlatban. Fizikai Szemle, 1976. XXVI. 1.
4. Jánossy I., Bata L.: Folyadékkristályok és ipari alkalmazásai. Műszaki Gazdasági Tájékoztató 10, 1082, 1974.
5. Bata L.: Folyadékkristályok — új anyagok a kutatás és a gyakorlati alkalmazások számára. Szilárdtestkutatás újabb eredményei. Akadémiai Kiadó. Budapest, 1980.
6. J. Szabon, L. Bata, K. Pintér: Thermal properties of disubstituted liquid crystalline phenyl benzoates. KFKI—74—82.
7. L. Bata, V. Broude, L. Rosta: Solid state polymorphism of PAA. KFKI—76—42 és Mol. Cryst. Liq. Cryst. 44, 71, 1978.
8. L. Bata, Á. Buka: Dielectric measurements on smectic-A and nematic phases. II. International Conference of Socialist Countries, 1977. Napospart, Bulgária; KFKI—77—66 és Acta Physica Polonica A54, 635 1978.
9. L. Bata, C. Haranadh, G. Molnár: Dielectric dispersion of a room temperature nematic liquid crystal mixture. KFKI—74—55.
10. L. Bata, G. Molnár: Dielectric dispersion measurements in a nematic mixture. Chem. Phys. Lett. 33, 535, 1975.
11. Á. Buka and L. Bata: Static dielectric permittivity measurements on aligned smectic-C phase. Mol. Cryst. Liq. Cryst. Lett. 49, 159, 1979.
12. L. Bata, Á. Buka, G. Molnár: Rotary motion of molecules about their short axis. Sixth International Liquid Crystal Conference, Kent, 1976; KFKI—76—70 és Mol. Cryst. Liq. Cryst. 38, 155, 1977.
13. L. Bata, I. Vizi: The rotational diffusion of p-azoxy-anisole molecules in liquid crystal and isotropic liquid state. KFKI—73—60.
14. L. Bata, I. Vizi: Interpretation of the quasi-elastic neutron scattering on PAA by rotational diffusion models. KFKI—74—75.
15. L. Bata, I. Vizi, S. Kugler: Rotational diffusion motion of PAA molecules in liquid crystal state. Solid State Comm. 18, 55, 1976.
16. L. Bata, I. Vizi: Temperature dependence of the circular random walk relaxation time. Phys. Lett. 56A, 92, 1976.
17. L. Bata, I. Túttö: Investigation of the circular random walk motion in nematic materials. Sixth International Liquid Crystal Conference, Kent, 1976; KFKI—76—69 és Mol. Cryst. Liquid Cryst. 38, 163, 1977.
18. L. Bata, É. Koszó, N. Kroó: Neutron spectrometer for inelastic scattering. KFKI—2—1966.
19. L. Bata: On the molecular dynamical investigation of liquid crystals. Second Liquid Crystal Conference of Socialist Countries, 1977. Napospart, Bulgária; KFKI—77—106.
20. L. Bata: Molecular dynamics in uniaxial liquid crystals. Acta Physica Polonica A54, 625. 1978.
21. L. Bata, Á. Buka, I. Jánossy: Reorientation of Nematic Liquid Crystals by Alternating and Static Fields. Solid State Comm. 15, 647, 1974.
22. L. Bata, Á. Buka, I. Jánossy: Electric Field Induced Instabilities in Nematic Liquid Crystals. KFKI—73—32. Electro-optical Crystals and Liquid Crystals in Science and Industry Vo. II., Techn. Univ. Łódź, 1976.
23. L. Bata, Á. Buka, I. Jánossy: On the Theory of Electrically Controlled Birefringence. KFKI—73—70. Electro-optical Crystals and Liquid Crystals in Science and Industry. Vo. II., Techn. Univ. Łódź, 1976.
24. I. Jánossy, L. Bata: Study of Elastic Properties Near a Nematic-Smectic-A Transition. Acta Physica Polonica, A54, 643, 1978.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A folyadékkristályok megismerésére és hazai elterjesztésére intézetünkben kis munkacsoport alakult. A disszertációmban nem a csoport eredményeit mutattam be, hiszen több sikeresen művelt területet, pl. a hidrodinamikai instabilitásokat, téreffektusokat, kalorimetrikus vizsgálatokat, NMR-méréseket, az alkalmazott neutronspektroszkópiai módszert stb. éppen csak érintettem. Mégis miután azokra gondolok, akik a téma beindításában döntöttek és segítettek, úgy érzem, az osztály tagjainak tartozok köszönettel. Nemcsak azért, mert a mérések elvégzésében segítségemre voltak, hanem mert a több éves munka során lefolytatott diskussziók hatása is beivódott a leírt anyagba.

Elektrooptikai és dielektromos mérések terén nyújtott segítségért *Dr. Buka Ágnesnek* és *Dr. Molnár Gábornak*, kalorimetrikus mérésekért *Szabon Jánosnak*, neutronspektroszkópiai mérések terén *Vizi Imrénnek*, egy matematikai modell tökéletesítése terén *Tüttő Istvánnak*, általános diskusszióikért *Jánossy Istvánnak*, a számológépes programok írása terén végzett munkájáért *Kugler Sándornak* tartozok köszönettel.

Köszönettel tartozom *Tompa Kálmánnak*, a fizikai tudományok doktorának, *Kósa Somogyi Istvánnak*, a kémiai tudományok doktorának és *Vasvári Bélának*, a fizikai tudományok kandidátusának a kézirat elolvasásáért és hasznos megjegyzéseikért.

IRODALOM

- Ac76. Achard, M. F., J. de Physique C—3—107, 1976.
 Ax66. Axmann, A., Z. Naturforsch. 21a, 615, 1966.
 Ba73. Barnes, J. D., J. Chem. Phys. 58, 5193, 1973.
 Bu76. Buka, Á., Jánossy, I., J. de Physique 37, 965, 1976.
 Ca77. Cabid, D., J. de Physique 8, 419, 1977.
 Ch77. Chandrasekhar, S., Liquid Crystals. Indian Academy of Sciences 1977.
 Co65. Cole, R. H., J. Chem. Phys. 42, 637, 1965.
 Dg74. DeGennes, The Physics of Liquid Crystals. Clarendon Press. Oxford. 1974.
 Fo74. Foster, D., Phys. Rev. Letters 32, 1161, 1974.
 Ga70. Galerne, Y., Compt. Rend. Acad. Sci. Paris 278, S—B—347, 1974.
 Gu77. Guyon, E., Jánossy, I., J. Optics 8, 357, 1977.
 He69. Helfrich, W., J. Chem. Phys. 51, 4092, 1969.
 Penz, P. A., Phys. Rev. A6, 1676, 1972.
 He70. Helfrich, W., J. Chem. Phys. 53, 2267, 1970.
 He75. Hervet, H., J. de Physique 37, 587, 1975.
 Hi69. Hill, N. E., Dielectric Properties and Molecular Behaviour, Van Nostrand, 1969.
 Já76. Jánossy, I., Pieranski, P., Guyon, E.: J. de Physique 37, 1106, 1976.
 Ja71. Janik, J. A., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 15, 189, 1971; Solid State Comm. 13, 1521, 1973.
 Je74. de Jeu, W. H., Phys. Rev. Lett. 32, 40, 1974; J. Chem. Phys. 61, 1985, 1974.
 Ki71. Kiss, D., Neutronfizika, Akadémiai Kiadó, 1971.
 Kr70. Krigbaum, N. R., Acta Cryst. B26, 97, 1970.
 Ku77. Kugler, S., Műegyetemi doktori értekezés, 1977.
 Le74. Lee, F. T., Phys. Lett. 48A, 68, 1974.
 Le76. Leadbetter, A. J., J. de Physique C3, 65, 1976.
 Ma71. Martin, A., Faraday Symp. No. 5. 1971.
 Mc71. McMillan., Phys. Rev. A6, 936, 1972; Phys. Rev. A4, 1238, 1971 és Phys. Rev. A8, 1921, 1973.
 No73. Nordio, P. L., Molecular Physics 25, 129, 1973.
 Pa75. Pataki, Gy., KFKI—75—33.
 Pe34. Perrin, I. J., Phys. Radium 5, 947, 1934.
 Po77. Pócsik, I., Tompa, K., Lasanda, J., Kugler, S., Náray—Szabó, G., KFKI—77—40.
 So72. Soref, R. A., J. Appl. Phys. 43, 2029, 1972.
 Tö74. Töpler, I., Mol. Cryst. Liq. Cryst. 26, 297, 1974.
 Vo76. Volino, F., J. de Physique C—3—55, 1976.
 Wi63. Williams, R., J. Chem. Phys. 39, 384, 1963.
 Wu75. Wulf, A., Phys. Rev. A11, 365, 1975.
 Wü74. Würstlin, F. Z., Kristallografia 88, 185, 1974.
 Ze77. Zeks, B., Blinc, R., Proc. of Second Liquid Cryst. Conf. Soc. Countries. Sunny Beach, 1977.

TÉRIDŐ SZIMMETRIÁK A MÉRTÉKELMÉLETEKBEN*

FORGÁCS PÉTER

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	249
1. Alapozás	252
2. Mértékterek szimmetriái	257
3. A szimmetria generátorok megkonstruálása	264
4. A szimmetria egyenletek megoldása	265
5. A hatás dimenzionális redukciója	270
6. Forgásszimmetrikus mértékpotenciálok megkonstruálása	272
7. Összefoglalás és kitekintés	275
Függelék	277
Köszönetnyilvánítások	278
Irodalomjegyzék	278

BEVEZETÉS

Kis túlzással azt lehetne mondani, hogy a jelenlegi elméleti részecskefizika a mértékelméletek fizikája. Az elektromágnesség és a gyenge kölcsönhatások jelenlegi elmélete, a Weinberg—Salam-elmélet, mely igen jó egyezést en van a tapasztalattal, egy $SU(2) \times U(1)$ spontán sértett mértékelmélet. Az erős kölcsönhatások leírására javasolt elmélet az úgynevezett kvantum színdinamika (QCD) pedig egy $SU(3)$ mértékelmélet. Jelenleg már rengeteg úgynevezett Nagy Egyesített Elmélet ismeretes, amelyek az erős, a gyenge és az elektromágneses kölcsönhatásokat egyesítik különböző módon és közös vonásuk az, hogy valamennyi Nagy Egyesített Elmélet mértékelmélet. Már az Einstein-féle gravitációelméletet is lehetett bizonyos fajta mértékelméletként értelmezni [1].

A mértékelméletek nagyfokú népszerűsége részben azon alapszik, hogy ezen elméletek renormálhatóak és a spontán szimmetriasértés a renormálhatóságot nem rontja el. Másrészt a nem ábeli mértékelméletek „aszimptotikusan szabadok”, tehát az effektív csatolási állandó a szereplő tömegekhez képest nagy impulzusoknál (kis távolságokon) nullához tart, s így ott a perturbációszámítás alkalmazható. A perturbatív QCD-vel a jelenlegi nagyenergiás kísérleti eredmények kielégítően megmagyarázhatók, de az egyelőre még nincs tisztázva, hogyan keletkeznek a kvarkokból a hadronok, és vajon tényleg van-e kvarkbezárás az elméletben, minthogy ezen kérdések vizsgálatához nem perturbatív módszerek szükségesek. Az mindenestre kísérletileg bizonyított tény, hogy a hadronok és mezonok kiterjedt, bonyolult belső szerkezetű objektumok.

* Érkezett 1981. jan. 28. Doktori értekezés, Budapest, 1980.

Egy lehetséges nem perturbatív vizsgálat kiindulási pontját képezheti az elmélet klasszikus megoldásainak vizsgálata. Elképzelhető ugyanis, hogy a hadronok első közelítésben, a kvantumeffektusok figyelmen kívül hagyásával leírhatók mint olyan klasszikus megoldások, amelyek minden időpillanatban véges térrészben lokalizáltak, véges energiasűrűséggel rendelkeznek (ún. szolitonok) [2]. A következő lépésben a szemiklasszikus WKB-közelítés térelméleti általánosítása [3] segítségével lehet kvantumkorrekciókat számolni az adott klasszikus megoldáshoz. Az ily módon nyert eredmények nem kaphatók meg a standard perturbációs számítás módszereivel. Egy másik megközelítést javasolt *Polyakov* [4], aki rámutatott arra, hogy igen fontos szerepet játszanak az euklideszi térben értelmezett Yang—Mills-elmélet (amelyet az időkoordináta tiszta imagináriussá történő elfolytatása után kapunk) véges hatású megoldásai, az úgynevezett instantonok, amelyek az euklideszi funkcionál integrál nyeregpontra módszerrel történő kiértékelésénél dominálnak. Az instantonok nem triviális topológiával rendelkező megoldások („négydimenziós szolitonok”) és létük arra mutat, hogy az elméletben végtelen sok vákuumállapot van és ezek között az alagúteffektus végén teremtenek kapcsolatot. Degererált vákuumállapotok esetén a standard perturbációs számítás spontán szimmetriasértést mutat. Az instantonok az alagúteffektus révén a szimmetriát helyreállítják és ily módon a Goldstone-bozon elkerülhető és az úgynevezett $U(1)$ problémát meg lehet oldani [5].

Fontos tehát a különböző modellek klasszikus mozgásegyenleteinek megoldásait fölteképezni. Ezt a feladatot jelentősen megnehezíti az egyenletek bonyolult, nemlineáris szerkezete különösen 3 vagy 4 dimenzió esetén, ahol is igen kevés egzakt megoldás ismeretes. A különböző modellek különböző szolitonyszerű megoldásainak (vortexek, monopólusok, instantonok) tanulmányozásában a téridő szimmetriák jelentős szerepet játszanak. A különböző szimmetriák megléte ugyanis lényegesen leegyszerűsíti a megoldandó egyenleteket. Például a t'Hooft—Polyakov-monopólus [6] gömbszimmetrikus, a BPST instanton [7], mely az $SU(2)$ mértékelmélet öndualitási egyenleteinek megoldása, 4 dimenziós forgásszimmetriát, *Witten* általánosabb sok-instanton megoldása pedig 3 dimenziós forgásszimmetriát mutat [8]. Ezen szimmetriák azonban nem jelennek meg egyszerűen a vektorpotenciál — A_μ — szintjén, mely nem lesz invariáns ezen szimmetriákkal szemben. Hasznosnak mutatkozik ezért egy olyan módszer kidolgozása, amelyek segítségével meg lehet konstruálni tetszőleges mértékelméletben egy adott szimmetriával rendelkező legáltalánosabb mértékpotenciált. Eddig csak többé-kevésbé ad hoc módon lehetett az adott szimmetriájú anszot A_μ -re fölírni. Másrészt a szimmetriáknak számos érdekes következménye van a mértékelméletekben; így például megfigyelték, hogy egy tiszta — tehát csak mértéktereket tartalmazó — Yang—Mills-elmélet bizonyos szimmetriák esetén egy alacsonyabb dimenziós Yang—Mills—Higgs-elmélettel ekvivalens. Mivel a spontán szimmetriasértéshez nélkülözhetetlen Higgs-tereket kézzel kell az elméletbe „betenni”, érdekes minden olyan próbálkozás, amely a Higgs-tereket természetes módon származtatná.

Ebben az értekezésben olyan módszert fejlesztünk ki, melynek segítségével tetszőleges szimmetriacsoport és tetszőleges mértékcsoporthoz megkonstruálhatók a legáltalánosabb szimmetrikus mértékpotenciálok, valamint a fent említett jelenség megértését is lehetővé teszi, s ily módon a Higgs-terek „geometrizálására” nyílik lehetőség.

Érdemes itt megjegyezni, hogy a szokásos elektrodinamikában (ahol a mértékcsoport $U(1)$) sem triviális a szimmetriák kérdése. Frenkel és Hraskó [9] bebizonyították, hogy az elektromágneses tér (\mathbf{E}, \mathbf{H}) egy adott elemi szimmetriájához mindig van olyan A_μ , mely rendelkezik ezzel az adott elemi szimmetriával. Elemi szimmetria alatt egy adott irányú eltolási vagy egy adott tengely körüli forgatási szimmetriát értünk. Teljesen világos, hogy a vektorpotenciálnak nem lehet több szimmetriája, mint a térerősség tenzornak, $F_{\mu\nu}$ -nek. Ha azonban $F_{\mu\nu}$ -ek több elemi szimmetriája van, akkor általában nincs olyan A_μ , mely egyidejűleg valamennyi szimmetriával rendelkezne. Például tekintünk egy homogén, z tengely irányú mágneses teret. Ekkor az elektromágneses tér elemi szimmetriái következők: bármely tengely mentén való eltolás, és bármely z -vel párhuzamos tengely körüli elforgatás. Ha a tér leírására most az

$$A_x = -Hy, \quad \varphi = A_y = A_z = 0$$

potenciált választjuk, A_μ invariáns x és z irányú eltolásokkal szemben; az

$$A'_x = -\frac{1}{2}Hy, \quad A'_y = \frac{1}{2}Hx, \quad A'_z = \varphi' = 0$$

választással élve A_μ invariáns z menti eltolásokkal és a z -vel párhuzamos tengelyek körüli forgatásokkal szemben, de nem létezik olyan A_μ potenciál, amely valamennyi szimmetriát egyidejűleg mutatná.

Az alap gondolat, amely segítségével a szimmetriák a mértékelméletekben vizsgálhatók, tulajdonképpen roppant egyszerű. Ha ugyanis végrehajtunk A_μ -n valamilyen transzformációt (például egy elforgatást), akkor nem kell megkövetelni, hogy A_μ invariáns legyen ezen transzformációval szemben, elég ha egy mértéktranszformáció segítségével A_μ megváltozása kikompenzálható, hiszen minden fizikai mennyiség független a mértéktranszformációktól. Egyetlen elemi szimmetria esetén, mindig elérhető, hogy A_μ ténylegesen invariáns legyen, több szimmetria esetén mint arról a főnti egyszerű példa esetén meggyőződhetünk, már távolról sem ez a helyzet.

A dolgozat kiindulási pontja az, hogy a mértékpotenciál szimmetriájának főntebb vázolt intuitív definícióját matematikailag megfogalmazzuk infinitézimális elmozdulásokra, az úgynevezett Lie-deriváltak segítségével. Ily módon eljutunk egy, a szimmetrikus mértékpotenciálokat meghatározó úgynevezett „szimmetria” egyenletrendszerhez. Ezeket a szimmetriaegyenleteket teljesen megoldjuk, mint differenciálegyenleteket, de bizonyos algebrai kényszereket ki kell még elégíteni, amelyek a szimmetriacsoport és a mértékcsoport Lie-algebráit kapcsolják össze. Egy fontos lépés a számolások során szükségessé teszi a szimmetriacsoport egy alcsoportjának beágyazását a mértékcsoportba. Eddig az egész szimmetriacsoportot beágyazták, s emiatt az, általunk nyert szimmetrikus potenciálok osztálya jelentősen nagyobb, mint az amit a régebbi módszerekkel kaptak, és természetesen tartalmazza azokat. A szimmetrikus mértékpotenciál több tetszőleges függvényt tartalmaz, melyek egy alacsonyabb dimenziós téridőn mértékterekként és skalárterekként értelmezhetők. Amennyiben a téridő sokaság metrikája ugyanazon szimmetriákkal rendelkezik, mint a mértékterek, a Yang—Mills-hatás redukálódik egy alacsonyabb dimenziós Yang—Mills—Higgs-hatássá. Általában az ily módon nyert mértékcsoport a kiindulásul vett mértékcsoportnak egy alcsoportja, s az alacsonyabb dimenziós sokaság akkor is görbült lehet, ha az eredeti nem volt az vagy fordítva.

Az értekezés első fejezetében röviden összefoglaljuk a mértékelméletek formalizmusát, részletesen tárgyaljuk az ún. Witten-ansatz sajátosságait és végül bevezetjük a számunkra nélkülözhetetlen Lie-derivált fogalmát.

A második fejezetben definiáljuk a szimmetrikus mértékpotenciálokat és megvizsgáljuk a szimmetriaegyenletek fő következményeit.

A harmadik és negyedik fejezetben röviden tárgyaljuk a Lie-csoportok differenciálgeometriájának számunkra fontos részeit és megoldjuk a szimmetriaegyenleteket.

Az ötödik fejezetben elvégezzük a hatás dimenzionális redukcióját, s megmutatjuk, hogy általában Higgs-terek jelennek meg negyedfokú potenciállal.

A hatodik fejezetben az általunk kidolgozott matematikai apparátus egy alkalmazásaként megmutatjuk, hogyan konstruálhatók meg az $SO(3)$ szimmetriát mutató mértékpotenciálok és levezetjük a Witten-ansatzot.

A dolgozatban az első fejezet kivételével jórészt önálló eredmények szerepelnek, hacsak más hivatkozást nem jelöltünk meg.

Az értekezés anyaga már publikálásra került [10].

1. Alapozás

Először röviden összefoglaljuk a mértékelméletek formalizmusának főbb sajátosságait, továbbá bevezetjük jelöléseinket és konvencióinkat.

Legyen G egy kompakt Lie-csoport, s Lie algebrájának $[L(G)]$ generátorait jelölje $\{T^a\}$:

$$[T^a, T^b] = g^{abc} T^c, \quad (1.1)$$

ahol g^{abc} a csoport $\{T^a\}$ bázisra vonatkoztatott struktúra állandói. Mi a T^a generátorokat antihermitikusnak vesszük, így a g^{abc} struktúra állandók valósak és teljesen antiszimmetrikusak. Mivel G kompakt, mindig elérhető, hogy $\text{Tr}(T^a T^b) = -2\delta^{ab}$ fennálljon. Tekintsünk most egy φ skalárteret, amely a G csoport adjungált ábrázolása szerint transzformálódik:

$$\varphi' = g\varphi g^{-1}, \quad \varphi = \varphi^a T^a \in L(G). \quad (1.2)$$

Lokális mértéktranszformációk esetén az (1.2)-ben szereplő g a téridő sokaságon értelmezett függvény lesz, $g = g(x)$ s ilyenkor $\partial_\mu \varphi$ már nem transzformálódik kovariáns módon:

$$\partial_\mu \varphi' = g \partial_\mu \varphi g^{-1} + (\partial_\mu g) \varphi g^{-1} + g \varphi \partial_\mu g^{-1}. \quad (1.3)$$

Hogy a nem kívánatos két második tagtól megszabaduljunk, bevezetjük az ún. mértékpotenciálokat — A_μ^a — és definiáljuk a velük asszociált Lie-algebra elemeket:

$$A_\mu = A_\mu^a T^a \in L(G). \quad (1.4)$$

Az így bevezetett mértékterek transzformációs törvénye:

$$A'_\mu = A_\mu^{g(x)} = g A_\mu g^{-1} + (\partial_\mu g) g^{-1}. \quad (1.5)$$

Az ún. kovariáns derivált

$$D_\mu \varphi = \partial_\mu \varphi - [A_\mu, \varphi], \quad (1.6)$$

ahol $[A_\mu, \varphi] = A_\mu \varphi - \varphi A_\mu$, transzformációs törvénye:

$$\begin{aligned}(D_\mu \varphi)' &= g \partial_\mu \varphi g^{-1} + (\partial_\mu g) \varphi g^{-1} + g \varphi \partial_\mu g^{-1} - \\ &\quad - [g A_\mu g^{-1} + (\partial_\mu g) g^{-1}, g \varphi g^{-1}] \\ &= g (D_\mu \varphi) g^{-1} + g \varphi \partial_\mu g^{-1} + g \varphi g^{-1} (\partial_\mu g) g^{-1} \\ &= g (D_\mu \varphi) g^{-1},\end{aligned}$$

mert $\partial_\mu g^{-1} = -g^{-1}(\partial_\mu g)g^{-1}$, tehát $D_\mu \varphi$ kovariáns módon transzformálódik. Következésképpen, ha a térerősségtenzort így definiáljuk:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - [A_\mu, A_\nu], \quad (1.7)$$

akkor minden φ -re

$$[D_\mu, D_\nu] \varphi = -[F_{\mu\nu}, \varphi]. \quad (1.8)$$

Könnyen belátható, hogy $F_{\mu\nu}$ is az adjungált ábrázolás szerint, kovariánsan transzformálódik:

$$F'_{\mu\nu} = g F_{\mu\nu} g^{-1} \quad (1.9)$$

$F_{\mu\nu}$ csakis ábeli esetben lesz invariáns, ezért a nem ábeli mértékelméletekben $F_{\mu\nu}$ -nek még nincs közvetlen fizikai jelentése csak a $\text{Tr}(F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma})$ mértékinvariáns mennyiségnek (csoportskalár).

A D_μ operátorokra vonatkozó Jacobi-azonosságból:

$$0 = [D_\lambda, [D_\mu, D_\nu]] + [D_\mu, [D_\nu, D_\lambda]] + [D_\nu, [D_\lambda, D_\mu]] \quad (1.10)$$

az (1.8) alkalmazásával adódik:

$$D_\lambda F_{\mu\nu} + D_\mu F_{\nu\lambda} + D_\nu F_{\lambda\mu} = 0. \quad (1.11)$$

Az (1.11) alatti összefüggések az ún. Bianchi-azonosságok, melyek a duális térerősség-tenzor

$${}^* F^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma} \quad (1.12)$$

bevezetésével a következő alakban írhatók:

$$D_\rho {}^* F^{\mu\rho} = 0. \quad (1.13)$$

A tiszta Yang—Mills-hatás egy D dimenziós sokaságon:

$$A = \frac{1}{4} \int d^D x \sqrt{g} F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu}, \quad (1.14)$$

ahol $g = |\det g_{\mu\nu}|$, $g_{\mu\nu}$ a sokaságon értelmezett metrikus tenzor. Az (1.14) hatás variációjával kapott mozgásegyenletek:

$$D_\nu (\sqrt{g} F^{\mu\nu}) = 0 \quad (1.15)$$

most a sokaság metrikáját nem variáltuk.

A Yang—Mills—Higgs-hatás alakja pedig:

$$A = \int d^D x \left\{ \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + \frac{1}{2} (D_\mu \varphi)^a (D^\mu \varphi)^a - V(\varphi) \right\}. \quad (1.16)$$

A híres t'Hooft—Polyakov [6] monopólus egy spontán sértett SU(2) mérték-elmélet véges energiájú sztatikus, gömbszimmetrikus megoldása. Az ansatz, amelyből a gömbszimmetrikus monopólus megoldás adódik, a következő:

$$A_t^a = 0, \quad A_i^a = -\varepsilon_{aij} \frac{x_j}{r^2} (1 - K(r)), \quad \varphi^a = \frac{x^a}{r} H(r), \quad (1.17)$$

ahol $r = \sqrt{x_i x_i}$ ($i = 1, 2, 3$).

Szemmel láthatóan az (1.17) ansatz rem invariáns a térbeli forgatásokkal szemben, míg a monopólus energiasűrűsége, mint arról könnyen meggyőződhetünk, gömbszimmetrikus lesz. A lényeg itt az, hogy bár A_μ^a nem invariáns a forgatásokkal szemben, A_μ^a megváltozása kompenzálható egy mértéktranszformációval. Ténylegesen ez itt annyit jelent, hogy (1.17) szimmetrikus a

$$\mathbf{J} = -i\mathbf{r} \times \nabla + i\mathbf{T} \quad (1.18)$$

„teljes impulzusmomentum” által generált forgatásokra nézve, ahol $\mathbf{T} = (T^1, T^2, T^3)$ az SU(2) csoport (konstans) generátorai. (1.18) alapján arra lehet gondolni, hogy a megfelelő kvantummechanikai képletben a monopólusnak a határozott spinje lenne. Másrészt (1.18) matematikailag úgy értelmezhető, hogy a szimmetriacsoportot (cserélve ez SO(3)) beágyaztuk a mértékcsoportba.

Egy másik érdekes példa, melyet a továbbiakban sokszor idézünk majd, és ezért részletesen foglalkozunk vele az ún. Witten-ansatz [8], mely egy négydimenziós euklideszi térben háromdimenziós forgásszimmetriával és tetszőleges (euklideszi) időfüggéssel rendelkező konfigurációt ír le egy tiszta SU(2) mértékelméletben. Witten az SU(2) öndualitási egyenletek ($F_{\mu\nu}^a = {}^*F_{\mu\nu}^a$) egy olyan véges hatású megoldását találta meg ansatzja alapján, melyek egy tengelyen elhelyezkedő N instantonnak felelnek meg.

Az ansatz a következő:

$$A_j^a = \frac{\varphi_2 + 1}{r^2} \varepsilon_{jak} x_k + \frac{\varphi_1}{r^3} (\delta_{ja} r^2 - x_j x_a) + A_1 \frac{x_j x_a}{r^2}$$

$$A_t^a = A_0 \frac{x^a}{r} \quad (1.19)$$

(1.19) egyszerűbb alakra hozható, ha átírjuk gömbi polárkoordinátákba (t, r, θ, φ) és elvégezzünk egy egyszerű mértéktranszformációt, úgy hogy A_t^a, A_r^a csak $a=3$ esetén rendelkezik zérustól különböző komponenssel, (ún. ábeli mérték):

$$A_t^a = (0, 0, A_0)$$

$$A_r^a = (0, 0, A_1)$$

$$A_\theta^a = (-\varphi_1, -\varphi_2, 0)$$

$$A_\varphi^a = (\varphi_2 \sin \theta, -\varphi_1 \sin \theta, -\cos \theta), \quad (1.20)$$

ahol $A_0, A_1, \varphi_1, \varphi_2$ $a(t, r)$ koordináták tetszőleges függvényei. A hatás

$$A = \frac{1}{4} \int d^4 x \sqrt{\det h_{\mu\nu}} F_{\mu\nu}^a F_{\sigma\tau}^a h^{\mu\sigma} h^{\nu\tau}, \quad (1.21)$$

ahol $h^{\mu\nu}$ az euklideszi tér metrikája polár koordinátában

$$h^{\mu\nu} = D \operatorname{diag} \left(1; 1; \frac{1}{r^2}; \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \right). \quad (1.22)$$

Mivel a Lagrange-függvény nem függ a polárszögektől, integrálás után az (1.21) hatás így redukálódik:

$$A = 8\pi \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} dr \sqrt{g} \left[\frac{1}{8} F_{ij} F^{ij} + \frac{1}{2} (D_i \varphi_m) (D^i \varphi_m) + \frac{1}{4} (1 - \varphi_1^2 - \varphi_2^2)^2 \right], \quad (1.23)$$

ahol

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i; \quad i, j=0, 1; \quad x^0=t, x^1=r$$

$$D_i \varphi_m = \partial_i \varphi_m + \varepsilon_{mn} A_i \varphi_n; \quad m, n=1, 2; \quad \varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1$$

és az i, j indexeket a $g^{ij} = r^2 \delta^{ij}$ metrikával húzzuk föl. Az (1.23) nem más, mint egy kétdimenziós görbült téren értelmezett ábeli Higgs-modell. A g_{ij} metrikából kiszámított görbületi skalár $R = -2$, tehát ez a „tér” egy állandó negatív görbületű felület (hiperszféra). Azt láttuk tehát, hogy egy tiszta SU(2) mértékelmélet a gömb-szimmetria föltételezésével néhány meglepetéssel szolgál: az eredeti négydimenziós sík tér kétdimenziós görbült térré redukálódott, Higgs-terek jelentek meg (spontán szimmetriasértésre vezető potenciállal) és az eredeti mértékcsoport U(1)-re redukálódott.

Azt hiszem, a fenti két példa kellőképpen érzékeltette, hogy a szimmetriák kérdése mennyire nem triviális a mértékelméletekben. Eddig az ilyen szimmetrikus potenciálok fölírása többé-kevésbé ad hoc módszerekkel történt, s célunk az, hogy ezt a problémát egy jól definiált matematikai föladattá fogalmazzuk át, amelynek a megoldása az adott szimmetriájú legáltalánosabb potenciálokat szolgáltatja. Tekintettel arra, hogy az ehhez szükséges legalapvetőbb matematikai segédeszköz a Lie-derivált, mely talán nem minden fizikus számára ismeretes, ezért most röviden ismertetjük főbb tulajdonságait. Megemlítjük itt, hogy a Lie-derivált elméletének igen kiterjedt irodalma van [11], ezért a részletesebb tárgyalást illetően arra utalunk.

Legyen φ egy D dimenziós M sokaság önmagára való leképezése:

$$\varphi: M \rightarrow M; \quad x \mapsto \bar{x} = \varphi(x). \quad (1.24)$$

Mivel valamilyen szimmetriák összessége a sokaság egy mozgáscsoportjának felel meg, a φ leképezés pl. definiálhatja ezeket a mozgásokat. Ez a leképezés indukálja a sokaság fölött értelmezett tenzorok leképezését is. Ezen indukált leképezések leírásához asszociáljunk a φ leképzéssel egy koordinátatranszformációt, $x^\mu \rightarrow x^{\mu'}$, oly módon, hogy az x pont koordinátái a vesszős koordinátarendszerben megegyeznek a transzformált, $\bar{x} = \varphi(x)$ pont koordinátaival az eredeti koordinátarendszerben, azaz

$$x^{\mu'} = \bar{x}^\mu. \quad (1.25)$$

Elegendő lesz egy $\xi^\mu(x)$ (kontravariáns) vektormező által generált infinitézimális leképezésre szorítkozni:

$$\bar{x}^\mu = x^\mu + \varepsilon \xi^\mu(x), \quad (1.26)$$

ahol ε egy „kis” paraméter. Ha az (1.26) leképezés a szimmetriacsoport egy eleme által generált elmozdulás, akkor ξ^μ -t a szimmetria generátorának fogjuk nevezni. A tenzorokon ható asszociált leképezések a következő módon definiálhatók: tekintsünk egy kovariáns vektormezőt, A_μ -t és definiáljuk a transzformált vektormezőt, $\bar{A}_\mu(x)$ -t, oly módon, hogy komponensei a vesszős koordinátarendszerben az x pontban, $\bar{A}_\mu(x)$, egyezzenek meg A_μ vesszőtlen koordináta-rendszerbeli komponenseivel az \bar{x} pontban, azaz

$$\bar{A}_\mu(x) = A_\mu(\bar{x}). \quad (1.27)$$

Az A_μ vektormező ξ^μ -szerinti Lie-deriváltját így definiáljuk:

$$L_\xi A_\mu = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (\bar{A}_\mu(x) - A_\mu(x)). \quad (1.28)$$

Mivel

$$\bar{A}_\mu(x) = \frac{\partial x^{\nu'}}{\partial x^\mu} A_{\nu'}(x) = (\delta_\mu^\nu + \varepsilon \partial_\mu \xi^\nu) (A_\nu + \varepsilon \xi^e \partial_e A_\nu).$$

Ezért egy kovariáns vektormező ξ^μ szerinti Lie-deriváltja a következő:

$$L_\xi A_\mu = \xi^e \partial_e A_\mu + (\partial_\mu \xi^e) A_e. \quad (1.29)$$

Valamilyen $\psi(x)$ skalárra a Lie-derivált mint az könnyen látható a definícióból, éppen a ξ -irányú gradiens:

$$L_\xi \psi = \xi^e \partial_e \psi. \quad (1.30)$$

Egy általános tenzormező esetén pedig

$$\begin{aligned} L_\xi T_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots} &= (\partial_\mu \xi^\lambda) T_{\lambda\nu}^{\rho\sigma\dots} + (\partial_\nu \xi^\lambda) T_{\mu\lambda}^{\rho\sigma\dots} + \dots \\ &\quad - (\partial_\lambda \xi^\rho) T_{\mu\nu}^{\lambda\sigma\dots} - (\partial_\lambda \xi^\sigma) T_{\mu\nu}^{\rho\lambda\dots} - \dots \\ &\quad + \xi^\lambda \partial_\lambda T_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots}, \end{aligned} \quad (1.31)$$

tehát a Lie-derivált egy (r, s) tenzort (r, s) tenzorba visz át, azaz a tenzortípust megőrzi. A Lie-derivált további fontos tulajdonságai: szorzat deriválása esetén érvényes a Leibnitz-szabály, továbbá az index kontrakciók és a deriválás sorrendje közömbös.

Ezen előkészületek után kimondjuk a következő definíciót: valamilyen $T_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots}$ tenzormező rendelkezik a $\xi^\mu(x)$ vektormező által generált szimmetriával, ha

$$\bar{T}_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots}(x) = T_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots}(x) \quad (1.32)$$

(1.32)-ből rögtön következik, hogy

$$L_\xi T_{\mu\nu}^{\rho\sigma\dots} = 0 \quad (1.33)$$

mely utóbbi egyenlet azt jelenti, hogy $A_\mu(x)$ alak invariáns a ξ^μ vektormező integrálgörbéin való mozgathatóság esetén. Az (1.32) definíció jelentését egy egyszerű példával illusztráljuk. Vegyük föl a koordinátarendszer egyik tengelyét ξ^μ irányba

(ún. ξ -hez illesztett koordinátarendszer), ilyenkor ξ komponensei $\xi^\mu = (1, 0, 0, \dots)$. Ebben a koordinátarendszerben az (1.32) definícióból rögtön adódik a

$$\frac{\partial}{\partial x^1} T_{\mu\nu\dots}^{\sigma\dots} = 0$$

egyenlet, ami azt jelenti, hogy a $T_{\mu\nu\dots}^{\sigma\dots}$ nem függ az x^1 koordinátától (x^1 -irányú eltolási szimmetria).

Amennyiben a metrikus tenzor ξ^μ szerinti Lie-deriváltja zérus, $L_\xi g_{\mu\nu} = 0$, akkor ξ^μ -t Killing-vektornak nevezzük.

Végül még egy új fogalmat vezetünk be: két ξ_m, ξ_n (kontravariáns) vektormező Lie-zárójelét, vagy kommutátorát, $[\xi_m, \xi_n]$ -et, mely maga is kontravariáns vektormező:

$$[\xi_m, \xi_n]^\mu = L_{\xi_m} \xi_n^\mu = \xi_m^\alpha \partial_\alpha \xi_n^\mu - \xi_n^\alpha \partial_\alpha \xi_m^\mu. \quad (1.34)$$

2. Mértékterek szimmetriái

Az előző fejezet meggondolásait most konkrétan alkalmazzuk, és először definiáljuk a szimmetrikus mértékpotenciálokat. Nem követeljük meg, hogy az (1.32) egyenlet teljesüljön, hanem az előzőekben motivált meggondolások alapján egy gyengébb föltételt, mégpedig azt, hogy létezzék olyan $g_0(x) \in G$, hogy

$$\bar{A}_\mu(x) = A_\mu^{g_0(x)}(x). \quad (2.1)$$

Itt szeretnénk megjegyezni, hogy ez a definíció véges elmozdulásokra és mértéktranszformációkra is értelmes. Infinitézimális leképezés (elmozdulás) esetén a mértéktranszformáció is infinitézimális, azaz

$$g_0(x) = 1 + \varepsilon W(x), \quad (2.2)$$

ahol $W = W^a T^a$ a G mértékcsoporth Lie-algebrájának egy eleme, s ilyenkor $A_\mu^{g_0(x)}$ expliciten fölírható:

$$A_\mu^{g_0(x)} = A_\mu(x) + \varepsilon D_\mu W. \quad (2.3)$$

A (2.1) szimmetria föltételből most rögtön következik az

$$L_\xi A_\mu = D_\mu W \quad (2.4)$$

egyenlet, amelyet a továbbiakban az A_μ mértékpotenciálra vonatkozó szimmetria-egyenletnek nevezünk.

Ha föltételezzük, hogy W koordináta skalár, és mértéktranszformáció esetén inhomogén módon transzformálódik a következő szabály szerint:

$$\begin{aligned} W^g &= gWg^{-1} + \xi^a(\partial_a g)g^{-1} \\ &= gWg^{-1} + (L_\xi g)g^{-1} \end{aligned} \quad (2.5)$$

akkor (2.4) szimmetria egyenlet általános koordinátatranszformációkra és ami most még fontosabb, tetszőleges mértéktranszformációkra nézve invariáns lesz.

Tetszőlegesen adott $\xi^\mu(x)$ vektormező esetén létezik olyan ξ -hez illesztett koordináta-rendszer, hogy $\xi^\mu = (1, 0, \dots)$ ekkor (2.5)-ből kapott

$$W_\theta = gW + \partial_1 g = 0 \quad (2.6)$$

egyenletnek mindig létezik megoldása $g(x)$ -re. A megoldás:

$$g = P \exp - \int_0^{x_1} W(y, x^2, x^3, \dots, x^D) dy, \quad (2.7)$$

ahol a P szimbólum a Dyson-féle időrendező operátor analogonja. Ily módon a W egy mértéktranszformáció segítségével mindig eltüntethető, s ebtén a mértékben a ξ^μ -höz illesztett koordináta-rendszerben (2.4) szimmetria egyenlet a $\partial_1 A_\mu = 0$ föltételre redukálható, amiből adódik, hogy A_μ az x^1 koordinátától nem függ. Amikor azonban több szimmetria is van, általában nem lehetséges valamennyi szimmetria egyenleten végrehajtani a szükséges koordináta- és mértéktranszformációkat, mint azt már egy egyszerű példán a klasszikus elektrodinamika esetén megmutattuk. Ilyenkor a szimmetria egyenletek általános alakja nélkülözhetetlen.

Itt megjegyezzük, hogy szimmetria föltételeink csak a mértékpotenciál koordináta kovariáns komponenseire vonatkoznak. A sokaság metrikus tenzorára tett föltételek nélkül a kontravariáns komponensek nem rendeznek semmiféle szimmetriával. A későbbiekben a metrikával részletesen foglalkozunk.

Most rátérünk annak az esetnek a vizsgálatára, amikor a mértékpotenciál egyidejűleg több szimmetriával rendelkezik. Ekkor a szimmetria egyenletek:

$$(\partial_\mu \xi_m^q) A_q + \xi_m^q \partial_q A_\mu = D_\mu W_m; \quad 1 \leq m \leq N. \quad (2.8)$$

Innen rögtön következik, hogy a szimmetriák egy vektorteret feszítenek ki, ugyanis ha a

$$\xi^\mu(x) = \lambda_m \xi_m^\mu(x) \quad (2.9)$$

vektormező tetszőleges lineárkombinációja a ξ_m vektormezőeknek konstans λ_m együtthatókkal, akkor a Lie-derivált tulajdonságai alapján:

$$L_\xi A_\mu = D_\mu (\lambda_m W_m). \quad (2.10)$$

Föltételezzük, hogy A_μ valamennyi szimmetriája ezen vektortérhez tartozik.

Legyen most ξ_m, ξ_n , két szimmetriagenerátor. A megfelelő Lie-deriváltak kommutátora a szimmetria egyenletek alapján:

$$[L_{\xi_m}, L_{\xi_n}] A_\mu = L_{\xi_m} (D_\mu W_n) - L_{\xi_n} (D_\mu W_m) \quad (2.11)$$

(2.11) így alakítható:

$$L_\eta A_\mu = D_\mu (L_{\xi_m} W_n - L_{\xi_n} W_m - [W_m, W_n]), \quad (2.12)$$

ahol η a ξ_m és a ξ_n vektormezők Lie-zárójele:

$$\eta = [\xi_m, \xi_n]. \quad (2.13)$$

A (2.12) egy újabb szimmetria egyenlet, s a föltételezésünk alapján η -nak a szimmetria generátorok által kifejlesztett vektortérhez kell tartoznia, ezért

$$[\xi_m, \xi_n] = f_{mnp} \xi_p, \quad (2.14)$$

ahol az f_{mnp} -k konstansok, s ekkor a szimmetria egyenletek integrálhatósági feltétele:

$$L_{\xi_m} W_n - L_{\xi_n} W_m - [W_m, W_n] - f_{mnp} W_p = 0. \quad (2.15)$$

Mivel a Lie-zárójel antiszimmetrikus és teljesíti a Jacobi-azonosságot, ezért a vektormezők által kifeszített vektortér, mely a Lie-zárójelre mint műveletre nézve zárt, egy Lie-algebra prototípusa. Az f_{mnp} szerkezeti állandók kielégítik a megfelelő követelményeket:

$$f_{mnp} = -f_{nmp} \quad (2.16)$$

$$f_{mnp} f_{pqr} + f_{nap} f_{pmr} + f_{qmp} f_{pnr} = 0. \quad (2.17)$$

A (2.15) egyenlet levezetésénél tettünk egy hallgatólagos föltevést, mégpedig azt, hogy nincs olyan $\psi \neq 0$, amire $D_\mu \psi = 0$ teljesülne. Ha

$$\partial_\mu \psi - [A_\mu, \psi] = 0 \quad (2.18)$$

akkor ψ a mértékcsoport Lie-algebrájának Cartan részalgebrájába transzformálható, ekkor ψ konstans és A_μ kommutál ψ -vel. Ilyenkor az eredeti elmélet, egy olyan mértékelméletté redukálódik, amelynek mértékcsoportja a ψ kiscsoportja, s ezt a „degenerált” esetet külön kell vizsgálni.

Az irodalomban eddig használt definíciója a forgásszimmetriának a mi általános formalizmusunk egy speciális esete. A háromdimenziós térbeli forgatások három szimmetria generátora derékszögű koordináta-rendszerben:

$$\xi_m^i = \varepsilon^{mj} x^j \quad m = 1, 2, 3. \quad (2.19)$$

A ξ_m^i -k kielégítik a megfelelő $SO(3)$ algebrát:

$$[\xi_m, \xi_n] = \varepsilon_{mnp} \xi_p. \quad (2.20)$$

Most a (2.15) integrabilitási feltételek konstans $W_m = -T^m$ megoldását véve, a szimmetria egyenletek a következő alakban írhatók:

$$\varepsilon_{ijk} x_j \partial_k A_l + \varepsilon_{ilk} A_k - [T^i, A_l] = 0. \quad (2.21)$$

A forgásszimmetria tehát a „teljes” impulzus momentum eltűnését jelenti, ahol a teljes impulzus momentum

$$\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \nabla + \mathbf{S} + \mathbf{T} \quad (2.22)$$

a pálya impulzus momentum, a spin és az általánosított izospin összege, ami az (1.18) egyenletnek felel meg.

Visszatérve az általános esethez, most levezetjük a mértékpotenciálok szimmetriájából a térerősség tenzorra vonatkozó szimmetria egyenleteket. A (2.4) egyenletből

$$\begin{aligned} D_\nu L_\xi A_\mu - D_\mu L_\xi A_\nu &= (D_\nu D_\mu - D_\mu D_\nu) W \\ &= -[F_{\nu\mu}, W] \end{aligned} \quad (2.23)$$

(2.23) bal oldalát átalakítva kapjuk:

$$L_\xi F_{\mu\nu} = [F_{\mu\nu}, W] \quad (2.24)$$

Ami megfelel annak a szimmetria feltételnek, amit egy mértékkovariáns objektum esetén várunk.

Végül a szimmetria egyenletek segítségével be fogunk vezetni bizonyos skalártereket, melyek a későbbiekben hasznosnak bizonyulnak és érdekes szimmetria tulajdonságokkal rendelkeznek. Lohe megmutatta [12], hogyha a mértékpotenciál nem függ az időtől, akkor az időszerű komponens, A_0 , skalár Higgs-térként, φ , interpretálható. Természetesen ilyenkor időfüggő mértéktranszformációkat nem engedhetünk meg. A térerősség tenzor bizonyos komponensei ekkor kovariáns deriváltakká redukálódnak, $F_{0i} = -D_i\varphi$. Ezt a gondolatot továbbfejlesztve Olive érdekes eredményeket ért el a monopólusok kvantumelméletében [13]. Mi most Lohe észrevételét általánosítjuk. A (2.8) szimmetria egyenletek fölhasználásával kapjuk:

$$\begin{aligned}\xi_m^\mu F_{\mu\nu} &= \xi_m^\mu (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - [A_\mu, A_\nu]) \\ &= D_\nu W_m - (\partial_\nu \xi_m^\mu) A_\mu - \xi_m^\mu \partial_\nu A_\mu - [\xi_m^\mu A_\mu, A_\nu] \\ &= D_\nu (W_m - \xi_m^\mu A_\mu).\end{aligned}\quad (2.25)$$

Bevezetve a

$$\Psi_m = \xi_m^\mu A_\mu - W_m \quad (2.26)$$

skalártereket, a térerősség tenzor egy részét kovariáns deriváltakká alakítottuk:

$$\xi_m^\mu F_{\mu\nu} = -D_\nu \Psi_m. \quad (2.27)$$

A Ψ_m terek a (2.26) definíciókból adódóan mértéktranszformációk esetén kovariáns módon transzformálódnak, tehát jogos őket (mérték) skalárnak tekinteni. Emiatt (2.27) egyenlet nem függ a mérték választásától. Ezek a Ψ_m skalárterek még nem azonosak a később bevezetésre kerülő Higgs-terekkel, de azokhoz szervesen kapcsolódnak. A rájuk vonatkozó szimmetria egyenletek:

$$L_{\xi_m} \Psi_m - [W_m, \Psi_m] = 0 \quad (2.28)$$

ahol nincs összegzés az m indexre. A (2.28) és a (2.24) hasonlósága nem meglepő, hiszen mindkét esetben mértékkovariáns objektumokra vonatkozó szimmetria egyenletekről van szó. A (2.28)-nál erősebb állítás is levezethető, fölhasználva az A_μ -re vonatkozó szimmetria egyenleteket, valamint a (2.14), (2.15) integrabilitási föltételeket. Ekkor

$$L_{\xi_m} \Psi_n - [W_m, \Psi_n] = f_{mnp} \Psi_p. \quad (2.29)$$

Ennek az egyenletnek fölhasználásával a térerősség tenzor kettős kontrakcióját könnyen kiszámíthatjuk:

$$\begin{aligned}\xi_m^\mu \xi_n^\nu F_{\mu\nu} &= -\xi_n^\nu (\partial_\nu \Psi_m - [A_\nu, \Psi_m]) \\ &= -L_{\xi_n} \Psi_m + [W_n + \Psi_n, \Psi_m] \\ &= f_{mnp} \Psi_p - [\Psi_m, \Psi_n].\end{aligned}\quad (2.30)$$

Látható, hogy a térerősség tenzor bizonyos komponensei kifejezhetők mint a Ψ_m terek kovariáns deriváltjai, néhány más komponens pedig a Ψ_m terekkel algebrai úton kapcsolható össze. A későbbiekben ez teszi majd lehetővé számunkra, hogy a tiszta Yang—Mills-hatást Yang—Mills—Higgs-hatássá redukáljuk.

3. A szimmetria generátorok megkonstruálása

Ebben a fejezetben először azzal foglalkozunk, hogyan lehet egy adott Lie-zárójel algebrát (ami tulajdonképpen egy parciális differenciálegyenlet-rendszer) kielégítő valamennyi szimmetria generátort megkonstruálni. Tekintsük a következő Lie-algebrát adott f_{mnp} struktúra állandókkal:

$$[\xi_m, \xi_n]^\mu = \xi_m^\alpha \partial_\alpha \xi_n^\mu - \xi_n^\alpha \partial_\alpha \xi_m^\mu = f_{mnp} \xi_p^\mu \quad (3.1)$$

Célunk az, hogy megkonstruáljuk a (3.1) egyenletrendszer megoldásait. Tételezzük föl, hogy bármely adott pontban a ξ_m vektorok a teljes D dimenziós tangens tér egy N' dimenziós alterét feszítik ki. Ekkor Frobenius tétele alapján létezik olyan N' dimenziós hiperfelületek egy családja, X , amelyek tangensvektorai éppen a ξ_m vektorok, ha a (3.1) egyenlet kielégül. A továbbiakban csak egyetlen koordináta környezetre szorítkozunk, s így valamennyi megfontolásunk csak lokális érvényű, a globális problémákat a jelen tárgyalásban nem vesszük figyelembe. Az M sokaság vezessük be a következő koordináta-rendszert:

$$x^\mu = (x^i, y^\alpha); \quad 1 \leq i \leq D'; \quad 1 \leq \alpha \leq N'; \quad N' + D' = D. \quad (3.2)$$

Ily módon az X -be tartozó hiperfelületek jellemezhetők az $x^i = \text{konstans}$ feltétellel, s ekkor a ξ_m vektormezők komponensei

$$\xi_m^\mu = (0, \xi_m^\alpha). \quad (3.3)$$

Mivel mi a ξ_m irányú deriváltakkal foglalkozunk, elegendő egy adott X_0 felületre korlátozódni, ahol az x^i koordináták konstansok, s emiatt $\xi_m, W_m x^i$ függése figyelmen kívül hagyható. Ebben a fejezetben végig csak y -függőnek tekintjük W_m -t, ξ_m -t és ez utóbbit egy N' dimenziós vektormezőként fogjuk föl, amelynek komponensei ξ_m^α . Ideiglenesen eltekintünk a mértékpotenciál A_i ($1 \leq i \leq D'$) komponenseitől is.

A (3.1) egyenletrendszer alapmegoldása az S szimmetriacsoporton, mint sokaságon értelmezett infinitézimális jobbtranszlációk. Az S csoport egy absztrakt Lie-csoport, amelynek konstans mátrix generátorait jelöljük \mathcal{T}^m -mel, és struktúra-állandói ugyanazok az f_{mnp} konstansok, mint a (3.1)-ben, ezért fönnáll

$$[\mathcal{T}^m, \mathcal{T}^n] = f_{mnp} \mathcal{T}^p. \quad (3.4)$$

Föltételezzük, hogy ez a csoport félegyszerű, tehát az f_{mnp} struktúraállandók teljesen antiszimmetrikusak és normálási feltételük:

$$f_{mnp} f_{mnr} = 2\delta_{pr}. \quad (3.5)$$

Számunkra a csoportot egyértelműen meghatározza Lie algebrája, mivel egyetlen koordináta környezetre korlátozódunk. Most paraméterezzük az S csoportot az $y^{\hat{a}}$ koordinátákkal, pl. az $SO(3)$ csoport esetén az $y^{\hat{a}}$ paraméterek lehetnek az Euler-szögek. Legyen most $s(y^{\hat{a}}) \in S$, ekkor igaz a következő összefüggés:

$$s(1 + \varepsilon \mathcal{T}^m) = s + \varepsilon \xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} s, \quad (3.6)$$

ahol az $s(1 + \varepsilon \mathcal{T}^m)$ csoportelem koordinátái $y^{\hat{a}} + \varepsilon \xi_m^{\hat{a}}$. A (3.6) egyenlet éppen

definiálja az infinitézimális jobb-eltolásokat, $\xi_m^{\hat{a}}(y)$, az S csoporton. A Lie-derivált fölhasználásával (3.6) így írható:

$$s\mathcal{T}^m = L_{\xi_m} s. \quad (3.7)$$

Tekintve, hogy a \mathcal{T}^m generátorok konstansok, ezért

$$L_{\xi_m} L_{\xi_n} s = s\mathcal{T}^m \mathcal{T}^n. \quad (3.8)$$

Innen pedig rögtön adódik a (3.4), (3.7) összefüggés figyelembevételével:

$$(L_{\xi_m} L_{\xi_n} - L_{\xi_n} L_{\xi_m}) s = f_{mnp} L_{\xi_p} s. \quad (3.9)$$

Másrészt

$$\begin{aligned} [L_{\xi_m}, L_{\xi_n}] s &= \xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} (\xi_n^{\hat{\beta}} \partial_{\hat{\beta}} s) - \xi_n^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} (\xi_m^{\hat{\beta}} \partial_{\hat{\beta}} s) \\ &= (\xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} \xi_n^{\hat{\beta}} - \xi_n^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} \xi_m^{\hat{\beta}}) \partial_{\hat{\beta}} s \\ &= L_{[\xi_m, \xi_n]} s. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Így (3.9)-ből kapjuk:

$$L_{([\xi_m, \xi_n] - f_{mnp} \xi_p)} s = 0. \quad (3.11)$$

Emiatt

$$[\xi_m, \xi_n] = f_{mnp} \xi_p, \quad (3.12)$$

tehát a ξ_m infinitézimális jobbtranszlációk az S csoporton valóban kielégítik (3.1) egyenletet. Megjegyezzük itt, hogy ez a koordináták megválasztásától függetlenül teljesül. Amennyiben S egy N dimenziós (paraméteres) Lie-csoport $\xi_m^{\hat{a}}(y)$ -t egy $N \times N$ sehol sem szinguláris mátrixnak is tekinthetjük.

A (3.1) egyenletrendszer további megoldásait is megkaphatjuk, amelyek az S csoport jobb oldali mellékosztályain vannak értelmezve. Legyen R az S csoport egy $N - N'$ dimenziós alcsoportja, s jelölje $\mathcal{T}^m (N' + 1 \leq m \leq N)$ az R generátorait. A jobb oldali, Rs mellékosztályokat paraméterezzük az $y^{\hat{a}}$ koordinátákkal. A (3.6)-hoz hasonlóan írhatjuk:

$$Rs(1 + \varepsilon \mathcal{T}^m) = Rs + \varepsilon \xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} (Rs), \quad (3.13)$$

ahol az $Rs(1 + \varepsilon \mathcal{T}^m)$ jobb oldali mellékosztály koordinátái $y^{\hat{a}} + \varepsilon \xi_m^{\hat{a}}$. Az előzőek alapján könnyű belátni, hogy $\xi_m^{\hat{a}}(y)$ is kielégíti a (3.1) egyenletrendszert.

Ily módon megkonstruáltuk a (3.1) egyenletrendszer megoldásait az S csoport jobb oldali mellékosztályain. Ezzel egyúttal megkaptuk (3.1) összes megoldását is. Az S Lie-csoport az X_0 hiperfelületen ható transzformációs csoport. Tegyük föl, hogy R azon alcsoportja S -nek, mely egy adott z_0 pontot önmagára képez le. Legyen most z egy tetszőleges pont, és tegyük föl, hogy $s \in S$ a z pontot a z_0 -ba viszi. Ekkor az Rs mellékosztály valamennyi eleme leképezi z -t z_0 -ra, és azonosíthatjuk z -t Rs -sel. Ily módon mindig azonosíthatjuk az X_0 hiperfelületet az S/R faktortérrel, és $\xi_m^{\hat{a}}$ -t a megfelelő infinitézimális jobb-eltolásokkal. Rögzítsünk egy origót

$$s_0(y^{\hat{a}}) \in (Rs)(y^{\hat{a}}), \quad (3.14)$$

mindegyik jobb oldali mellékosztályban, ekkor S minden eleme egyértelműen paraméterezhető az $y^{\hat{a}} = (y^{\omega}, y^{\alpha})$ koordinátákkal a következő módon:

$$s(y^{\hat{a}}) = r(y^{\omega}) s_0(y^{\alpha}) \quad (3.15)$$

valamilyen $r(y^\omega) \in R$ -re. A (3.1)-t kielégítő $\xi_m^{\hat{a}}(y)$ vektormezőket a következőképpen írhatjuk föl az S csoporton:

$$\xi_m^{\hat{a}} = (\xi_m^\omega, {}^*\xi_m^\alpha). \quad (3.16)$$

Könnyen látható, hogy a ${}^*\xi_m^\alpha$ komponensek, melyek nem függenek az y^ω koordinátáktól, éppen az S/R faktortéren értelmezett szimmetria generátorok, amelyeket eddig ξ_m^α -val jelöltünk, azaz

$${}^*\xi_m^\alpha = \xi_m^\alpha. \quad (3.17)$$

A ξ_m^α generátorok tehát az S csoporton értelmezett szimmetria generátorokból egyszerű projekcióval megkaphatók.

Ezek után rátérünk a W_m segédtereket tartalmazó (2.15) integrálhatósági feltételek vizsgálatára. Először is vegyük észre, hogy bevezetve a

$$\nabla_{\xi_m} = L_{\xi_m} - W_m \quad (3.18)$$

kovariáns deriváltat, (2.15) így írható föl:

$$\nabla_{\xi_m} \nabla_{\xi_n} - \nabla_{\xi_n} \nabla_{\xi_m} - \nabla_{[\xi_m, \xi_n]} = 0. \quad (3.19)$$

A (3.19) éppen a W_m affin konnexió görbületi tenzora nem koordináta bázisban (ezért jelenik meg a $\nabla_{[\xi_m, \xi_n]}$ tag). Látjuk tehát, hogy a (2.8) szimmetria egyenletek integrabilitási feltétele a W_m -hez mint affin összefüggéshez tartozó görbületi tenzor eltűnésével ekvivalens, ami azt jelenti, hogy a (2.8) egyenletek geometriai tartalommal rendelkeznek. Ezzel kapcsolatban utalunk a [14] hivatkozásra. A (3.19) egyenlet az S/R faktortéren van értelmezve, ahol a $\xi_m^{\hat{a}}$ vektormezők az infinitézimális jobb-elölásokkal azonosíthatóak. A W_m mennyiségek is S/R -en értelmezettek, de most beágyazzuk az S/R -en értelmezett problémát a teljes S csoportba. E célból a W_m mennyiségeket formálisan az egész S csoporton értelmezzük, oly módon, hogy bármely mellékosztályon legyenek függetlenek az y^ω koordinátáktól:

$$W_m(y^\omega, y^\alpha) = W_m(y^\alpha); \quad \forall y^\alpha\text{-ra.} \quad (3.20)$$

Mivel a ξ_m^α generátorok projekcióval nyerhetők a $\xi_m^{\hat{a}}$ generátorokból, és W_m nem függ y^ω -tól, ezért W_m Lie deriváltja is kiterjeszthető az S csoportra:

$$L_{\xi_n} W_m = \xi_n^\alpha \partial_\alpha W_m = \xi_n^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} W_m. \quad (3.21)$$

A fentiek alapján a W_m mennyiségek a (2.15) konzisztencia egyenlet S -re történt kiterjesztésének is megoldásai, tehát

$$\xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} W_n - \xi_n^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} W_m - [W_m, W_n] - f_{mnp} W_p = 0, \quad (3.22)$$

ahol még a W_m -re vonatkozik az a megszorítás, hogy ne függjön az y^ω koordinátáktól. Mivel az S csoporton a $\xi_m^{\hat{a}}$ -k egy nem szinguláris mátrixnak is fölfoghatók, a

$$W_m = \xi_m^{\hat{a}} W_{\hat{a}} \quad (3.23)$$

definícióval meghatározott $W_{\hat{a}}$ mennyiségek (amelyek általában függenek az y^ω koordinátáktól) egyértelműek. A (3.23)-mal bevezetett $W_{\hat{a}}$ terekkel a (3.22) egyenlet leegyszerűsödik:

$$\partial_{\hat{a}} W_{\hat{\beta}} - \partial_{\hat{\beta}} W_{\hat{a}} - [W_{\hat{a}}, W_{\hat{\beta}}] = 0. \quad (3.24)$$

Ez annyit jelent, hogy az S szimmetria csoporton a $W_{\hat{a}}$ mennyiségek pusztán mértekkel reprezentálhatók, azaz

$$W_{\hat{a}} = (\partial_{\hat{a}} g) g^{-1}, \quad (3.25)$$

ahol $g(y^{\omega}) \in G$.

A (2.5) egyenlet alapján látható, hogy egy mértéktranszformáció hatására a $W_{\hat{a}}$ mennyiségek úgy transzformálódnak, mint a közönséges mértékpotenciál (affin konnexió):

$$W_{\hat{a}}^g = g W_{\hat{a}} g^{-1} + (\partial_{\hat{a}} g) g^{-1}. \quad (3.26)$$

Mivel az eredeti problémát most az egész szimmetria csoportra kiterjesztettük, kibővült a lehetséges mértéktranszformációk osztálya, mivel a mértéktranszformációk függhetnek az „extra” y^{ω} koordinátáktól is. A szimmetria csoporton tehát egy megfelelő mértékválasztással elérhető, hogy

$$W_{\hat{a}} = 0 \quad (3.27)$$

teljesüljön, amiből rögtön következik, hogy az S csoporton valamennyi $W_m = 0$ egy megfelelő mértékben. Az S/R faktortéren (amit mi az X_0 hiperfelülettel azonosítottunk) a (3.22) konzisztencia egyenletek W_m megoldásai nem függhetnek az y^{ω} koordinátáktól. Az eddigiek alapján tudjuk, hogy (2.15) valamennyi megoldása

$$W_m = \xi_m^{\hat{a}} (\partial_{\hat{a}} g) g^{-1} \quad (3.28)$$

alakban írható, de természetesen nem minden $g(y^{\omega}) \in G$ esetén lesz a (3.28)-ból számolt $W_m y^{\omega}$ -tól független. Az S/R faktortéren általában már nem lehet valamennyi W_m -t mértéktranszformáció segítségével eltüntetni, mivel ott a megengedett transzformációk nem függhetnek y^{ω} -tól. A (3.28) egyenlet arra nem nagyon használható, hogy a (2.15) konkrét megoldásait segítségével fölírjuk, de mint azt rövidesen látni fogjuk, erre nem is lesz szükség.

Következő lépésként magát a (2.8) szimmetria egyenleteket is be fogjuk ágyazni a teljes szimmetria csoportba. Emlékeztetünk arra, hogy az X_0 hiperfelületen a mértékpotenciálnak csak $A_{\alpha}(y^{\beta})$ komponenseivel foglalkozunk. Most az előzőekhez hasonlóan formálisan kiterjesztjük $A_{\hat{a}}$ -t a teljes S csoportra, oly módon, hogy ne függjön az R alcsoport y^{ω} koordinátáitól. Ezenkívül bevezetjük az y^{ω} koordinátáknak megfelelő A_{ω} extra komponenseket is, úgy hogy

$$A_{\hat{a}}(y^{\beta}) = (A(y^{\beta}), A_{\alpha}(y^{\beta})) = (0, A_{\alpha}(y^{\beta})). \quad (3.29)$$

Ez a formális manipuláció azért volt hasznos, mert így a szimmetria egyenletek bármely megoldása az S/R faktortéren, speciális esete egy megfelelő, az egész S csoporton értelmezett megoldásnak. Ezen állítás bizonyítására a csoporton értelmezett szimmetria egyenleteket írjuk szét a következő módon:

$$\begin{aligned} (\partial_{\omega} \xi_m^{\hat{a}}) A_{\hat{a}} + \xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} A_{\omega} &= \partial_{\omega} W_m - [A_{\omega}, W_m] \\ (\partial_{\beta} \xi_m^{\hat{a}}) A_{\hat{a}} + \xi_m^{\hat{a}} \partial_{\hat{a}} A_{\beta} &= \partial_{\beta} W_m - [A_{\beta}, W_m]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Az első egyenlet triviálisan kielégül, figyelembe véve, hogy S/R -n $A_{\omega} = 0$, valamint ξ_m^{α}, W_m nem függhetnek az y^{ω} koordinátától. A második egyenlet pedig éppen (2.8)-ra redukálódik.

A (3.30) szimmetria egyenleteket már könnyű lesz a csoporton megoldani. A megnövekedett mértéktranszformációs szabadságot arra használhatjuk, hogy $W_m=0$ fönnálljon, és ekkor a szimmetria egyenletek S -n:

$$L_{\xi_m} A_{\hat{a}} = 0. \quad (3.31)$$

A (3.1) egyenletből látható, hogy most a mértékcsoport teljesen lecsatolódt, s (3.31) komponensenként külön-külön megoldható:

$$L_{\xi_m} A_{\hat{a}}^a = 0. \quad (3.32)$$

Ez az egyenlet jól ismert a Lie-csoportok elméletében s a következő fejezetben részletesen analizáljuk.

4. A szimmetria egyenletek megoldása

Az előző fejezetben megmutattuk, hogy célszerű az eredetileg X_0 hiperfelületen (amit azonosítottunk az S/R faktortérrel), értelmezett szimmetria egyenleteket és azok integrabilitási föltételeit kiterjeszteni az egész S szimmetria csoportra, ahol a probléma jelentősen leegyszerűsödik. Ha most megoldottuk egyenleteinket a csoporton, akkor az egyetlen fönnmaradó probléma az lesz, hogy ezen megoldások közül ki kell választani a fizikailag érdekeseket, tehát a faktortéren értelmezetteket.

Először tehát szeretnénk megkonstruálni az S csoporton értelmezett legáltalánosabb invariáns tenzormezőt, mely kielégíti az

$$L_{\xi_m} T_{\hat{a}\hat{b}}^{\delta\delta\ldots} = 0 \quad (4.1)$$

egyenletet minden ξ_m infinitézimális jobb-transzlációra. E célból először definiáljuk a ξ_n infinitézimális bal-transzlációkat a következőképpen

$$L_{\xi_n} s = -\mathcal{T}_s^n, \quad s \in S \quad (4.2)$$

teljes analógiában a ξ_m infinitézimális jobb-transzlációt definiáló (3.7) egyenlettel. Az ottaniak alapján teljesen világos, hogy

$$[\xi_m, \xi_n] = f_{mnp} \xi_p. \quad (4.3)$$

Látható, hogy a ξ_m és a ξ_m vektormezők hasonló tulajdonságokkal rendelkeznek. Az egységelem környezetében $\xi_m = -\xi_m$. Számunkra az a legfontosabb tulajdonságuk, hogy a ξ_m és ξ_n vektormezők kommutátora zérus.

$$[\xi_m, \xi_n] = L_{\xi_m} \xi_n = 0, \quad \forall m, n. \quad (4.4)$$

Ugyanis a (4.2) egyenletre az L_{ξ_m} a (3.7)-re pedig az L_{ξ_n} operátorral hatva kapjuk:

$$L_{\xi_m} L_{\xi_n} s = -\mathcal{T}_s^n \mathcal{T}_s^m = L_{\xi_n} L_{\xi_m} s, \quad \forall m, n. \quad (4.5)$$

Innen adódik,

$$[L_{\xi_m}, L_{\xi_n}] = L_{[\xi_m, \xi_n]} = 0, \quad \forall m, n; \quad (4.6)$$

amiből rögtön következik a (4.4) egyenlet. Mivel

$$L_{\xi_n} \xi_m = [\xi_m, \xi_n] = 0, \quad \forall m, n, \quad (4.7)$$

ezért valamennyi ξ_n vektormező kielégíti a (4.1) egyenletet. A $\xi_m^{\hat{\alpha}}$ kontravariáns vektormezők mellett definiálhatjuk a $\xi_{m\hat{\alpha}}$ kovariáns vektormezőket is az alábbi módon:

$$\xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_{n\hat{\alpha}} = \delta_{mn}. \quad (4.8)$$

Innen rögtön adódik egy másik ortogonalitási reláció:

$$\xi_{m\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}} = \delta_{\hat{\alpha}}^{\hat{\beta}}. \quad (4.9)$$

Hasonlóan lehet definiálni a $\xi_{m\hat{\alpha}}$ kovariáns vektormezőket:

$$\xi_{m\hat{\alpha}} \xi_n^{\hat{\alpha}} = \delta_{mn}; \quad \xi_{m\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}} = \delta_{\hat{\alpha}}^{\hat{\beta}}. \quad (4.10)$$

Mivel δ_{mn} egy konstans skalár, amelynek valamennyi Lie-deriváltja eltűnik, a Leibnitz-szabály alapján rögtön következik, hogy

$$L_{\xi_m} \xi_{n\hat{\alpha}} = 0, \quad \forall m, n. \quad (4.11)$$

Ezek alapján könnyen fölírható a (4.1) egyenletet kielégítő invariáns tenzor:

$$T_{\hat{\alpha}\hat{\beta}}^{\hat{\gamma}\hat{\delta}} \dots = \lambda_{mn\dots pq\dots} \xi_{m\hat{\alpha}} \xi_{n\hat{\beta}} \dots \xi_p^{\hat{\gamma}} \xi_q^{\hat{\delta}} \dots, \quad (4.12)$$

ahol a $\lambda_{mn\dots pq\dots}$ mennyiségek konstansok. A Leibnitz-szabály miatt valamennyi $L_{\xi_m} T$ Lie-derivált eltűnik. Ténylegesen nincs is több invariáns tenzor, mert minden pontban $\xi_m^{\hat{\alpha}}$ és $\xi_{m\hat{\alpha}}$ vektorok teljes rendszert alkotnak. A legáltalánosabb tenzor (4.12) alakban írható, ahol a λ -k helyfüggők. A Leibnitz-szabály alapján azonban T csak akkor lesz invariáns, ha a λ -k konstansok. Így a (4.1) egyenletek legáltalánosabb megoldását (4.12) szolgáltatja.

Fontos szerepet játszik a következő invariáns tenzor:

$$\tilde{h}^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}}. \quad (4.13)$$

$\tilde{h}^{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$ a csoport (bal oldali) metrikus tenzora, ugyanis a (4.8) egyenlet alapján:

$$\xi_{m\hat{\alpha}} \tilde{h}^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = \xi_m^{\hat{\beta}} \quad (4.14)$$

(4.13) analógiájára definiálható a jobb oldali metrikus tenzor is:

$$h^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}}, \quad (4.15)$$

amely szintén invariáns, mivel

$$\begin{aligned} L_{\xi_m} h^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} &= (L_{\xi_m} \xi_n^{\hat{\alpha}}) \xi_n^{\hat{\beta}} + \xi_n^{\hat{\alpha}} (L_{\xi_m} \xi_n^{\hat{\beta}}) \\ &= f_{mnp} \xi_p^{\hat{\alpha}} \xi_n^{\hat{\beta}} + f_{mnp} \xi_n^{\hat{\alpha}} \xi_p^{\hat{\beta}} = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

fölhasználva az f_{mnp} struktúraállandók teljesen antiszimmetrikus voltát. Az egység-elemnél $\tilde{h}^{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$ és $h^{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$ megegyezik (ott ugyanis $\xi_m^{\hat{\alpha}} = -\xi_m^{\hat{\alpha}}$), amiből következik, hogy a csoport minden más pontjában is megegyeznek, ezért a csoportnak van egy egyértelmű metrikus tenzora, amelynek $\xi_m^{\hat{\alpha}}$ és $\xi_m^{\hat{\alpha}}$ a Killing-vektorai.

A föntihez hasonló érveléssel bizonyítható a következő hasznos összefüggés:

$$f_{mnp} \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_n^{\hat{\beta}} \xi_p^{\hat{\gamma}} = -f_{mnp} \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_n^{\hat{\beta}} \xi_p^{\hat{\gamma}}. \quad (4.17)$$

A bal oldalon szereplő tenzor nyilvánvalóan invariáns, míg a jobb oldal invarianciája következik a szerkezeti állandókra vonatkozó Jacobi-azonosságból. Ennek a tenzornak érdekes geometriai jelentése is van a csoporton, amire most röviden kitérünk.

A szimmetrikus Riemann—Christoffel-féle affin összefüggés, amit a csoporton értelmezett metrikus tenzorból kapunk

$$\left\{ \begin{matrix} \hat{\gamma} \\ \beta \quad \hat{\alpha} \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} h^{\hat{\gamma}\hat{\varepsilon}} (\partial_{\beta} h_{\hat{\alpha}\hat{\varepsilon}} + \partial_{\hat{\alpha}} h_{\beta\hat{\varepsilon}} - \partial_{\hat{\varepsilon}} h_{\beta\hat{\alpha}}) \\ = -\xi_{m\beta} \partial_{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\gamma}} + \frac{1}{2} f_{mnp} \xi_m^{\hat{\gamma}} \xi_n^{\hat{\alpha}} \xi_{p\beta}. \quad (4.18)$$

A csoporton azonban természetesebb a tenzorok párhuzamos eltolását azzal a követeléssel definiálni, hogy legyenek invariánsak a Lie-deriváltra nézve. Ekkor megmutatható, hogy az ily módon bevezetett affin összefüggés:

$$\Gamma_{\hat{\alpha}\beta}^{\hat{\gamma}} = -\xi_{m\beta} \partial_{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\gamma}}. \quad (4.19)$$

$\Gamma_{\hat{\alpha}\beta}^{\hat{\gamma}}$ nem szimmetrikus az alsó két indexében, és a torziótenzor, vagyis a (4.19) affin konnexió antiszimmetrikus része éppen (4.17). Érdekes tulajdonsága az ily módon bevezetett affin összefüggésnek, hogy míg a (4.19) esetében a Riemann-tenzor azonosan nulla, a torziómentes (4.18) összefüggésre pedig

$$R_{\hat{\beta}\hat{\gamma}\hat{\delta}}^{\hat{\alpha}} = \frac{1}{4} f_{mnp} f_{mqr} \xi_n^{\hat{\alpha}} \xi_{p\beta} \xi_{q\hat{\gamma}} \xi_{r\hat{\delta}}. \quad (4.20)$$

Ezután a rövid kitérő után visszatérünk a csoportra kiterjesztett szimmetria egyenletek megoldására. Mint azt már láttuk, S -n létezik olyan mérték, amelyben valamennyi $W_m = 0$, és a szimmetria egyenletek döntően leegyszerűsödnek:

$$L_{\xi_m} A_{\hat{\alpha}}^a = 0, \quad \forall m. \quad (4.21)$$

(4.12) alapján (4.21) legáltalánosabb megoldása rögtön fölírható:

$$A_{\hat{\alpha}}^a = \Phi_m^a \xi_{m\hat{\alpha}}, \quad (4.22)$$

ahol a Φ_m^a együtthatók függetlenek az $y^{\hat{\alpha}}$ koordinátáktól. Az eddig figyelmen kívül hagyott x^i koordinátákat és a megfelelő A_i mértékpotenciál komponenseket most újra bevezetjük. Az S/R faktorteret az S csoportba beágyazva abban a mértékben, ahol $W_m = 0$, a szimmetria egyenletek teljes megoldása

$$A_i^a = A_i^a(x) \quad (4.23)$$

$$A_{\hat{\alpha}}^a = \Phi_m^a(x) \xi_{m\hat{\alpha}}(y) \quad (4.24)$$

alakban írható, ahol az $A_i(x)$, $\Phi_m^a(x)$ mennyiségek az X téren vannak értelmezve, egyébként teljesen tetszőlegesek. A (2.26) alatt bevezetett Ψ_m skalártereket pedig a

$$\Psi_m = \xi_m^{\hat{\alpha}} \Phi_n \xi_{n\hat{\alpha}} \quad (4.25)$$

egyenlet szolgáltatja, ahol $\Phi_n = \Phi_n^a T^a$. Tekintve, hogy Ψ_m egy mértéktranszformáció hatására kovariáns módon transzformálódik, ezért a Φ_m terek ugyancsak

mértékkovariánsak, és a (4.25) egyenlet mértékinvariáns. A most bevezetett Φ_m mennyiségek fogják a dimenzionálisan redukált Lagrange-függvényben a Higgs-skalárok szerepét játszani.

A szimmetria csoporton az $A_{\hat{a}}$ -ra vonatkozó (4.22) megoldás a legáltalánosabb, de hátra van még az a már említett probléma, hogy most még ki kell választanunk azon megoldásokat, amelyek a faktortéren vannak értelmezve, s ez a követelmény bizonyos kényszer egyenleteket jelent A_i -re és Φ_m -re nézve. Megköveteljük, hogy a mértékpotenciál A_ω komponensei tűnjenek el és a többi komponens pedig legyen az y^ω koordinátáktól független. Ennek elégséges és nyilvánvaló módon szükséges feltétele az, hogy a térerősségtenzor valamennyi $F_{i\omega}$, $F_{\alpha\omega}$, $F_{\tau\omega}$ komponense tűnjön el, ami egy mértéktől független követelés, lévén a térerősség tenzor mértékkovariáns. Ha ugyanis az R alcsoport koordinátáinak megfelelő $F_{\tau\omega}$ komponensek eltűnnek, akkor létezik egy olyan mérték, ahol

$$A_\omega = 0 \quad (4.26)$$

és ebben a mértékben $F_{i\omega}$, $F_{\alpha\omega}$ akkor és csak akkor zérus, ha A_i , A_α nem függnék az y^ω koordinátáktól.

A térerősség tenzor explicit kiszámításához a (2.27) és a (2.30) kifejezéseket, illetőleg ezek nyilvánvaló kiterjesztését a szimmetria csoportra használjuk:

$$\xi_m^{\hat{a}} F_{\hat{a}i} = -D_i \Psi_m \quad (4.27)$$

$$\xi_m^{\hat{a}} \xi_n^{\hat{b}} F_{\hat{a}\hat{b}} = f_{mnp} \Psi_p - [\Psi_m, \Psi_n]. \quad (4.28)$$

Behelyettesítve ide a Ψ_m (4.25) alatti alakját, kihasználva továbbá a ξ_m vektormezők (4.8), (4.9) ortogonalitási feltételeit és a torziótenzorra vonatkozó (4.17) egyenletet, nyerjük

$$F_{\hat{a}i} = -\xi_{m\hat{a}} (\partial_i \Phi_m - [A_i, \Phi_m]) \quad (4.29)$$

$$F_{\hat{a}\hat{b}} = -\xi_{m\hat{a}} \xi_{n\hat{b}} (f_{mnp} \Phi_p + [\Phi_m, \Phi_n]). \quad (4.30)$$

Megköveteljük tehát, hogy $F_{i\omega}$, $F_{\hat{a}\omega}$ tűnjön el ebben a mértékben (és így minden mértékben), azaz

$$\xi_{n\omega} (\partial_i \Phi_n - [A_i, \Phi_n]) = 0 \quad (4.31)$$

$$\xi_{n\omega} (f_{mnp} \Phi_p + [\Phi_m, \Phi_n]) = 0. \quad (4.32)$$

Nem nehéz megállapítani, hogy a $\lambda_n \xi_{n\omega} = 0$ típusú feltétel mit jelent. Ugyanis a (3.15) és a (4.2) egyenletekből következően:

$$(\partial_\omega r) r^{-1} = -\mathcal{T}^m \xi_{m\omega}. \quad (4.33)$$

Amikor $m > N'$, azaz \mathcal{T}^m az R alcsoport generátora, a $\xi_{n\omega}$ -k az infinitézimális baltranszlációk az R alcsoporton, amikor pedig $m \leq N'$, akkor valamennyi $\xi_{m\omega}$ zérus. Ily módon a $\lambda_n \xi_{n\omega}$ eltűnéséhez megköveteljük, hogy $\lambda_n = 0$ legyen, ha $n > N'$, s ezért (4.31), (4.32) az alábbi kényszer egyenletekké redukálódnak:

$$\partial_i \Phi_n - [A_i, \Phi_n] = 0, \quad \forall i, \forall n > N' \quad (4.34)$$

$$f_{mnp} \Phi_p + [\Phi_m, \Phi_n] = 0, \quad \forall m, \forall n > N'. \quad (4.35)$$

A (4.35) egyenletből látható, hogy $\Phi' = \{-\Phi_m: m > N'\}$ a mértékcsoporth Lie-algebrájának egy R részalgebráját generálja. Föltételezzük, hogy Φ' hűen generálja az R részalgebrát. Bár R -nek a mértékcsoporthba, G -be történő beágyazása x -től függhet, Φ' elemei nem lehetnek teljesen tetszőlegesek. (4.34) miatt ezen tereknek a hatásban nem lenne kinetikus tagja. Ezért a Φ' elemeit konstansoknak tekintjük, ami mindig elérhető egy olyan y -független mértéktranszformációval, amely a mértékpotenciálok (4.23), (4.24) alatti alakját változtatlanul hagyja.

Az első kényszer egyenlet, (4.34), így arra redukálódik, hogy A_i kommutáljon Φ' valamennyi elemével, azaz a Φ' kiscsoportjához mint új mértékcsoporthoz az A_i -k lesznek a mértékpotenciálok. Ez a kiscsoport lesz a dimenzionálisan redukált hatásban a megmaradó mértékcsoporth. Ez következik abból az észrevételből, hogy mindkét kényszer egyenlet megoldása mértékinvariáns, de csak ezen kiscsoportban végrehajtott mértéktranszformáció esetén maradnak a Φ' elemei változatlanok. A második kényszer egyenletet, (4.35), is részletesen analizáltuk, de mivel ez nem tartozik a dolgozat fő részéhez, a részleteket illetően a függelékre utalunk. Ez a kényszer egyenlet az R algebra S/R fölötti indukált ábrázolását (M') és R G fölötti indukált ábrázolását (M'') kapcsolja össze. Ha M' irreducibilis komponenseit M'_i -vel, M'' -ét pedig M''_j -vel jelöljük, akkor minden (M'_i, M''_j) párnak, ahol a két komponens megegyezik, megfelel egy nem eltűnő Higgs-tér komponens (ami tehát tetszőleges).

A (4.34), (4.35) kényszer egyenletek azt biztosítják, hogy az S -n értelmezett mértékpotenciálok egy megfelelő mértéktranszformációval az eredeti téren (S/R) értelmezett szimmetria egyenletek megoldásaiba legyenek átvihetők. Az R csoportot mind az S , mind a G egy részcsoporthjával azonosítottuk, oly módon, hogy $m > N'$ esetén a \mathcal{T}^m generátorokat és $-\Phi_m = -\Phi_m^a T^a$ -t azonosítottuk. Mivel az S szimmetria csoporton

$$A_\omega = \Phi_m \tilde{\xi}_{m\omega} \quad (4.36)$$

(4.33)-ból következik, hogy A_ω az $r(y^\omega)$ csoportelemmel generált puszta mérték. Ily módon az a mértéktranszformáció, amely A_ω -t nullába viszi és a többi függetlenné teszi az y^ω koordinátától, éppen $r^{-1}(y^\omega)$. Ez a mértéktranszformáció A_i -t változtatlanul hagyja, mivel A_i kommutál az összes Φ_m ($m > N'$) generátorral és az A_α komponenseket pedig homogén módon transzformálja, ezért a szimmetria egyenletek végső megoldása az M sokaságon:

$$A_i = A_i(x) \quad (4.37)$$

$$A_\alpha = r^{-1} \Phi_m r \tilde{\xi}_{m\alpha}. \quad (4.38)$$

Ebben a mértékben a W_α komponensei

$$\begin{aligned} W_\omega &= -r^{-1} \partial_\omega r = -r^{-1} \Phi_m r \tilde{\xi}_{m\omega} \\ W_\alpha &= 0 \end{aligned} \quad (4.39)$$

Az M sokaságon pedig a W_m mennyiségek:

$$W_m = -r^{-1} \Phi_n r \tilde{\xi}_m^{\omega} \tilde{\xi}_{n\omega}. \quad (4.40)$$

Jól látható, hogy az M sokaságon W_m játssza az A_ω komponensek szerepét. Mivel konstrukció szerint A_α, W_m függetlenek az R alcsoport y^α koordinátáitól, ki-

számíthatjuk a szimmetrikus mértékpotenciálokat annál a speciális $y^\tau = y_0^\tau$ értéknél, amelyre $r(y_0^\tau) = 1$, s így a következő egyszerűbb kifejezéseket kapjuk:

$$A_\alpha = \Phi_m \xi_{m\alpha} \Big|_{y^\tau = y_0^\tau} \quad (4.41)$$

$$W_m = -\Phi_n \xi_m^\omega \xi_{n\omega} \Big|_{y^\tau = y_0^\tau} \quad (4.42)$$

5. A hatás dimenzionális redukciója

Most meg fogjuk mutatni, hogy az M sokaságon definiált tiszta Yang—Mills-hatás miként redukálható az X téren értelmezett Yang—Mills—Higgs-modellé. Amint azt már hangsúlyoztuk, mivel eddig az M sokaság metrikájáról nem tettünk föl semmit, a mértékpotenciál kontravariáns komponenseinek, A^μ -nek (ahol a μ indexet M metrikus tenzorával húzzuk föl) szimmetriájáról sem tudunk semmit.

Ha az M metrikáját, $h^{\mu\nu}(x^i, y^a)$ -t illetően nem élünk bizonyos föltevésekkel, akkor még abban az esetben sem tudunk sokat mondani a kontravariáns komponensek szimmetriájáról, ha az M sokaság lapos.

Adott fizikai helyzetben ténylegesen előadódhat, hogy a mértékpotenciál szimmetriája nem szimmetriája a metrikus tenzornak, azaz a ξ_m vektorok nem Killing-vektorok. Erre példaként szolgálhat *Manton* cikke [15], amelyben két monopólus között ható erőt számolta ki. A számolás során föltételezte, hogy az egymástól távollevő monopólusok mereven gyorsulnak. Megmutatható, hogy egy kiterjedt szoliton merev gyorsulása ekvivalens valamennyi tér L_ξ Lie-deriváltjának eltűnésével. Ebben az esetben ξ^μ nem egyenletes sebességű mozgást generál és nyilvánvalóan nem Killing-vektora a sík téridő metrikájának.

A Lagrange-függvényt csak akkor tudjuk redukálni, ha a metrikára egy speciális alakot tételezünk föl úgy, hogy az szimmetrikus lesz. A $h^{\mu\nu}(x^i, y^a)$ metrikus tenzorra eléggé természetes a következő ansatz:

$$h^{\mu\nu} = \left(\begin{array}{c|c} h^{ij}(x) & 0 \\ \hline 0 & \frac{1}{R^2(x)} h^{ab}(y^a) \end{array} \right), \quad (5.1)$$

ahol $h^{ij}(x)$ és $R(x)$ tetszőleges függvények és

$$h^{a\beta} = \xi_m^a \xi_m^\beta \quad (5.2)$$

azaz $h^{a\beta}$ a csoportmetrika projekciója a faktortérre. Világos, hogy $h^{a\beta}$ invariáns a faktortéren.

Szeretnénk a Lagrange-függvényt a Φ_m, A_i terekkel fölírni. Az eredeti hatás:

$$A = -\frac{1}{8} \text{Tr} \int d^D x^\mu h^{1/2} F_{\mu\nu} F_{\rho\sigma} h^{\mu\rho} h^{\nu\sigma} \quad (5.3)$$

(5.3)-t kifejtve kapjuk:

$$A = -\frac{1}{8} \text{Tr} \int d^{D'} x^i d^{N'} y^a h^{1/2} \times \\ \times \left[F_{ij} F_{kl} h^{ik} h^{jl} + \frac{2}{R^2} F_{i\alpha} F_{j\beta} h^{ij} h^{a\beta} + \frac{1}{R^4} F_{\alpha\beta} F_{\gamma\delta} h^{a\gamma} h^{b\delta} \right]. \quad (5.4)$$

A térerősség tenzor F_{ij} komponenseit csak az A_i potenciálok szerepelnek és ezért F_{ij} nem egyszerűsíthető tovább. A térerősség tenzor többi komponensét már kifejeztük a (4.29), (4.30) egyenletek segítségével. Ezeket az összefüggéseket még nem transzformáltuk olyan alakra, hogy azok a faktortéren legyenek értelmezve, habár tudjuk, hogy a kényszer egyenletek segítségével ez megtehető. Azonban a szimmetria csoporton számolva gyorsan célhoz érünk; ott ugyanis

$$F_{i\alpha}^a F_{j\beta}^a h^{ij} \xi_m^\alpha \xi_m^\beta = F_{\hat{\alpha}i}^a F_{\hat{\beta}j}^a \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}} h^{ij} \quad (5.5)$$

mivel a térerősség tenzor jobb oldalon szereplő, extra komponensei eltűnnek. A (4.29) kifejezés behelyettesítve a térerősség tenzorra, fölhasználva a bal és jobb oldali csoportmetrikák egyenlőségét, valamint a (4.8) ortogonalitási relációkat, (5.5) így alakul:

$$F_{i\alpha}^a F_{j\beta}^a h^{ij} \xi_m^\alpha \xi_m^\beta = (D_i \Phi_m)^a (D_j \Phi_m)^a h^{ij}. \quad (5.6)$$

A „rossz” mérték nem számít, mivel mértékinvariáns kifejezést számítottunk ki. Hasonlóan nyerjük

$$\begin{aligned} F_{\alpha\beta}^a F_{\gamma\delta}^a h^{\alpha\gamma} h^{\beta\delta} &= (f_{rst} \Phi_t + [\Phi_r, \Phi_s])^a (f_{rst} \Phi_t + [\Phi_r, \Phi_s])^a \\ &= 2\Phi_t^a \Phi_t^a + 2f_{rst} g^{abc} \Phi_t^a \Phi_r^b \Phi_s^c + \\ &+ g^{abc} g^{ade} \Phi_r^b \Phi_r^d \Phi_s^c \Phi_s^e = 2V(\Phi). \end{aligned} \quad (5.7)$$

A $h^{1/2}$ faktortól eltekintve a Lagrange-függvény explicit módon független az y^α koordinátáktól, ezért az y^α -ra vonatkozó integrálás elvégezhető, az eredmény:

$$\begin{aligned} A &= \Omega \int d^{D'} x R^{N'} (\det h_{ij})^{1/2} \left[\frac{1}{4} F_{ij}^a F_{kl}^a h^{ik} h^{jl} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2R^2} (D_i \Phi_m)^a (D_j \Phi_m)^a h^{ij} + \frac{1}{2R^4} V(\Phi) \right] \end{aligned} \quad (5.8)$$

ahol Ω a faktortér térfogata. Az (5.8) hatás még nincs kanonikus alakra hozva, mivel még a metrikus tenzortól eltekintve explicit $R(x)$ geometriai faktorokat tartalmaz. A metrikus tenzort újra definiálhatjuk:

$$g^{ij} = f(x) h^{ij} \quad (5.9)$$

amikor is (5.8) akkor és csak akkor hozható kanonikus alakra, ha

$$\begin{aligned} f(x) &= R^2(x) \\ D' + N' &= 4 \end{aligned} \quad (5.10)$$

azaz az eredeti M sokaság négydimenziós volt. Ekkor a hatás:

$$A = C \int d^{D'} x \sqrt{g} \left[\frac{1}{4} F_{ij}^a F_{kl}^a g^{ik} g^{jl} + \frac{1}{2} (D_i \Phi_m)^a (D_j \Phi_m)^a g^{ij} + V(\Phi) \right], \quad (5.11)$$

ahol a C egy konstans. (5.11) egy görbült téren értelmezett Yang—Mills—Higgs-hatást ír le még akkor is, ha az eredeti $h^{\mu\nu}$ metrika lapos, de a faktortér görbült. Egy másik fizikailag érdekes lehetőség az, hogy több mint négydimenzióból elindulva egy megfelelő szimmetria ansatzal az eredeti hatást négydimenziósra redukálni, és

ezt a redukált Lagrange-függvényt tekinteni fizikailag relevánsnak. Az R paraméternek ekkor konstansnak kell lennie (azt most itt kizárjuk, hogy a Higgs-terek tömege téridő függő legyen).

Ekkor az (5.8) Lagrange-függvény kanonikus alakra hozható, ha a Φ -t R -rel skálázzuk. R ekkor az Higgs-potenciálban szereplő csatolási állandók és tömegparaméterek hányadosában jelenik meg. Erre a lehetőségre egy érdekes példa az a hatdimenziós eset, ahol a két extra dimenzió egy R sugarú gömb. Ekkor ugyanis a négydimenziós Weinberg—Salam-modell bozonikus része reprodukálható és megfelelő mértékcsoporthoz tartozó esetén a megjósolt Weinberg-szög értéke a tapasztalattal egyező. Erre még visszatérünk a 7. fejezetben.

6. Forgásszimmetrikus mértékpotenciálok megkonstruálása

Ebben a fejezetben módszerünk alkalmazásaként levezetjük az $SO(3)$ szimmetrikus mértékpotenciálokat, különös tekintettel az első fejezetben említett (1.20) alatti ún. Witten-féle ansatzra. Konstruálunk „melléktermékeként” bebizonyítjuk, hogy négydimenzióban az (1.20) ansatz a lehető legáltalánosabb.

Az $SO(3)$ csoportot a három Euler-szöggel (χ, θ, φ) parametrizáljuk, és egy általános csoportelem $s(\chi, \theta, \varphi)$ a következőképpen írható föl:

$$s(\chi, \theta, \varphi) = R_z(\chi) R_x(\theta) R_z(\varphi), \quad (6.1)$$

ahol $R_z(\chi)$ -vel a z tengely körüli χ -szöggel történő elforgatást jelöltük. Mivel a z tengely körüli forgatások az $SO(3)$ csoport egy $SO(2)$ alcsoportját alkotják, s ezt az $SO(2)$ -t az R alcsoporttal azonosítva a (6.1) és a (3.15) egyenletek összehasonlításából rögtön megállapítható, hogy az $SO(3)/SO(2)$ faktortér koordinátái (φ) éppen a (θ, φ) paraméterek. Az $SO(2)$ paramétere (φ) a χ szög.

Az $SO(3)$ csoporton, (mely lokálisan egy S^3 gömb) az infinitézimális jobb-transzlációk, $\xi_m^a = (\xi_m^x, \xi_m^\theta, \xi_m^\varphi)$,

$$\begin{aligned} \xi_1^a &= \left(\frac{\sin \varphi}{\sin \theta}, \cos \varphi, -\operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \right), \\ \xi_2^a &= \left(\frac{\cos \varphi}{\sin \theta}, -\sin \varphi, -\operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \right), \\ \xi_3^a &= (0, 0, 1). \end{aligned} \quad (6.2)$$

A (6.2) generátorok az $SO(3)$ Lie-algebráját definiáló differenciálegyenletek

$$[\xi_m, \xi_n]^a = \xi_m^\beta \partial_\beta \xi_n^a - \xi_n^\beta \partial_\beta \xi_m^a = \varepsilon_{mnp} \xi_p^a$$

megoldásaként kaphatók meg. A faktortéren a $\xi_m^a = (\xi_m^\theta, \xi_m^\varphi)$ szimmetria generátorok egyszerű projekcióval nyerhetők a ξ_m^a generátorokból:

$$\begin{aligned} \xi_1^a &= (\cos \varphi, -\operatorname{ctg} \theta \sin \varphi) \\ \xi_2^a &= (-\sin \varphi, -\operatorname{ctg} \theta \cos \varphi) \\ \xi_3^a &= (0, 1). \end{aligned} \quad (6.3)$$

A ξ_m^i komponensek, melyeket nem tüntettünk föl, mind zérussal egyenlők. Az $SO(3)$ csoporton a metrikus tenzor, $h^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = \xi_m^{\hat{\alpha}} \xi_m^{\hat{\beta}}$

$$h^{\hat{\alpha}\hat{\beta}} = \frac{1}{\sin^2 \theta} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\cos \theta \\ 0 & \sin^2 \theta & 0 \\ -\cos \theta & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Az infinitézimális baltranszlációk a csoporton a következők:

$$\begin{aligned} \xi_1^{\hat{\alpha}} &= \left(\operatorname{ctg} \theta \sin \chi, -\cos \chi, -\frac{\sin \chi}{\sin \theta} \right), \\ \xi_2^{\hat{\alpha}} &= \left(-\operatorname{ctg} \theta \cos \chi, -\sin \chi, \frac{\cos \chi}{\sin \theta} \right) \\ \xi_3^{\hat{\alpha}} &= (-1, 0, 0). \end{aligned} \quad (6.5)$$

A szimmetrikus mértékpotenciálok megkonstruálásához szükséges $\xi_{m\hat{\alpha}}$ szimmetria generátorokat a (6.5) infinitézimális baltranszlációkból a $h_{\hat{\alpha}\hat{\beta}}$ metrikus tenzor segítségével számíthatjuk ki:

$$\begin{aligned} \xi_{1\hat{\alpha}} &= (0, -\cos \chi, -\sin \theta \sin \chi) \\ \xi_{2\hat{\alpha}} &= (0, -\sin \chi, \sin \theta \cos \chi) \\ \xi_{3\hat{\alpha}} &= (-1, 0, -\cos \theta). \end{aligned} \quad (6.6)$$

A (4.41) összefüggés alapján könnyen megkaphatjuk a szimmetrikus mértékpotenciálokat:

$$\begin{aligned} A_i &= A_i(x) \\ A_\theta &= -\Phi_1(x) \\ A_\varphi &= \sin \theta \cdot \Phi_2 - \Phi_3 \cos \theta. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Mivel a faktorteret definiáló $SO(2)$ alcsoport generátora T_3 volt, ezért még fennállnak az alábbi kényszeregyenletek:

$$[\Phi_3, A_i] = 0, \quad (6.8)$$

ahol Φ_3 a G mértékcsoporthoz Cartan-féle részalgebrájának egy tetszőleges (konstans) eleme. A (4.35) alatti kényszeregyenletek pedig:

$$\begin{aligned} [\Phi_3, \Phi_1(x)] &= -\Phi_2(x) \\ [\Phi_3, \Phi_2(x)] &= \Phi_1(x). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Végül a W_m mennyiségek a (4.42) alapján:

$$\begin{aligned} W_1 &= \Phi_3 \frac{\sin \varphi}{\sin \theta} \\ W_2 &= \Phi_3 \frac{\cos \varphi}{\sin \theta} \\ W_3 &= 0. \end{aligned} \quad (6.10)$$

A föntiek fölhasználásával nem okoz nehézséget a Witten-ansatz levezetése. Ekkor az M sokaság a négydimenziós euklideszi tér, (t, r, θ, φ) koordinátákkal, ahol a (θ, φ) gömbi polárszögeket a faktortér paramétereivel azonosítjuk, a mértékcsoport pedig szintén $SO(3)$. Mivel Φ_3 kiscsoportja $U(1)$, egy ábeli Higgs-elmélet megjelenése sejthető. Rögzítve azt a mértéket, ahol $\Phi_3^1 = \Phi_3^2 = 0$, a (6.8), (6.9) kényszer egyenletek megoldása:

$$A_t^a = (0, 0, A_t)$$

$$\Phi_1^a = (\varphi_1, \varphi_2, 0)$$

$$\Phi_2^a = (\varphi_2, -\varphi_1, 0)$$

$$\Phi_3^a = (0, 0, 1)$$

ahol $A_t, \varphi_1, \varphi_2$ a (t, r) koordináták tetszőleges függvénye. A (6.7) egyenletbe behelyettesítve rögtön célhoz érünk, tanulságos azonban a (4.24) alapján a szimmetria egyenletek csoporton értelmezett megoldásából kiindulni. Ekkor $A_a^a = \Phi_m^a \xi_m^a$:

$$A_\chi^a = (0, 0, -1)$$

$$A_\theta^a = (-\varphi_1 \cos \chi - \varphi_2 \sin \chi, -\varphi_2 \cos \chi + \varphi_1 \sin \chi, 0)$$

$$A_a^a = \sin \theta (-\varphi_1 \sin \chi + \varphi_2 \cos \chi, -\varphi_2 \sin \chi - \varphi_1 \cos \chi, -\text{ctg } \theta).$$

Látható, hogy az A_θ^a, A_φ^a komponensek függenek a „fölsőleges” (tehát a gömbön nem értelmezett) χ koordinátától és A_χ^a sem zérus. Elvégezve a

$$g(\chi) = e^{\chi T_3}$$

mértéktranszformációt (a harmadik izotengely körüli χ szögű elforgatás) a megtranszformált A_χ éppen eltűnik, a többi komponens pedig:

$$A_t^a = (0, 0, A_0)$$

$$A_r^a = (0, 0, A_1)$$

$$A_\theta^a = (-\varphi_1, -\varphi_2, 0)$$

$$A_\varphi^a = (\varphi_2 \sin \theta, -\varphi_1 \sin \theta, -\cos \theta)$$

ami éppen Witten-ansatz. ((6.7)-ből ez rögtön adódik.) Közvetlen behelyettesítéssel ellenőrizhető, hogy az eredeti sokaságon az

$$L_{\xi m} A_\mu = D_\mu W_m$$

szimmetria egyenletek kielégülnek. Most egyúttal azt is bebizonyítottuk, hogy a Witten-ansatz a legáltalánosabb. Szigorúan véve azonban vannak még „degenerált” esetek is, ugyanis ha φ_1 és φ_2 azonosan nulla, akkor Φ_3^a egy tetszőleges konstans, ez az eset egy tetszőleges töltésű ábeli monopólusnak felel meg. Ha valamennyi Φ_m eltűnik, a dimenzionális redukció után egy tiszta $SU(2)$ mértékelméletet kapunk. Az (1.23) alatti hatás az általános (5.8), illetve (5.11) képlet speciális eseteként adódik.

7. Összefoglalás és kitekintés

Ezen értekezésben egy általános módszert fejlesztettünk ki, melynek segítségével bármilyen kompakt mértékcsoporttal rendelkező mértékelméletben, tetszőleges szimmetria csoport esetén, megkonstruálhatók a szimmetrikus mértékpotenciálok. Matematikailag megfogalmaztuk a szimmetriák definícióját, oly módon, hogy a szimmetria csoport hatása A_μ -n legyen kompenzálható egy mértéktranszformációval:

$$L_{\xi_m} A_\mu = D_\mu W_m.$$

A ξ_m vektormezők a szimmetria csoport Lie-algebrájának egy ábrázolását adják az M sokaságon:

$$[\xi_m, \xi_n] = f_{mnp} \xi_p,$$

ahol f_{mnp} -k a megfelelő szerkezeti állandók. Föltételezve, hogy a szimmetria csoport nem hat az M sokaságon tranzitív módon, M fölírható olyan alterek egy családjaként, amelynek minden egyes tagja azonosítható a szimmetria csoport egy faktorterével. Például a négydimenziós euklideszi térben háromdimenziós forgásszimmetria ($SO(3)$) esetén ezen alterek a (t, r, θ, φ) koordináta-rendszerben adott (t, r) paraméterű gömbfelületek, amelyeket az $SO(3)/SO(2)$ faktortérrel azonosítunk. Megmutattuk, hogy ezen a faktortéren értelmezett szimmetrikus mértékpotenciálok kiterjeszthetők magára a szimmetria csoportra, mint sokaságra, ahol a mértékcsoporthoz lecsatlózik és a mértékpotenciálok a szimmetria csoport infinitézimális generátorai-val fejezhetők ki. Bizonyos, tisztán algebrai kényszerfeltételeket még ki kell elégíteni, hogy a faktortéren jól definiált megoldást kapjunk.

Ezen szimmetriák jelenléte esetén természetes módon skalárterek jelennek meg és a tiszta mértékelmélet egy alacsonyabb dimenziós Yang—Mills—Higgs-moddal redukálódik egy jól meghatározott negyedfokú potenciállal.

A főnti összefoglaló után szeretnénk röviden foglalkozni eredményeink egy érdekes fizikai alkalmazásával, a Weinberg—Salam-modell hat dimenzióból történő megközelítésével, melyet *Manton* dolgozott ki részletesen [16].

Arra a lehetőségre, hogy a magasabb dimenzióknak szerepe lehet a fizikában, először *Kaluza* és *Klein* [17] mutattak rá, akiknek sikerült geometrizálni az Einstein—Maxwell-elméletet oly módon, hogy a téridő dimenzióját kiterjesztették öt-re. A magasabb dimenziók iránti érdeklődés a 70-es évek végén jelentősen megnőtt. Egyfelől az ún. duális rezonancia modellek egy rendkívül meglepő és nagyon elegáns vonása az, hogy „megjósolják” a téridő dimenzióját, ami azonban négynél nagyobbak adódott; pl. az ún. Neveu—Ramond—Schwarz-modellben a téridő dimenziója 10 kell, hogy legyen. Kérdés, hogy mihez lehet kezdeni a „fölös” dimenziókkal. *Scherk* és *Schwarz* [18] javasolták: tekintsük ezen „fölös” dimenziókat kompaktnak, akkor a mindennapi fizikai tapasztalatokkal nem kerülünk ellentmondásba, ugyanakkor természetes módon be lehet vezetni az $O(N)$ szimmetriát. A dimenziók kompaktifikálásának témájában úttörő munkát végzett *Cremmer* és *Scherk*. Ők mutatták ki először [19], hogy az Einstein-egyenleteknek $4+N$ dimenzióban Yang—Mills-terek jelenlétében van olyan klasszikus megoldása, ahol a teljes tér-idő előáll, mint a négydimenziós Minkowski-tér (M^4) és egy állandó görbületű, térszerű, kompakt „belső tér” direkt szorzata. Ennek a belső térnek (amely náluk S^N volt) a méretei a Planck-hossz (10^{-33} cm) nagyságrendjébe esnek. Ez tehát geometriai módon történő spontán szimmetriasértés, ami azért különösen érdekes, mert a gravitációt vala-

milyen módon kapcsolatba hozza a részecskefizikával. Ennek a gondolatnak az általánosításaival és alkalmazásaival kapcsolatban az irodalomra utalunk [20]. Másrészt az ún. kiterjesztett szupergravitációs elméletek [21] megkonstruálása különösen egyszerű magasabb dimenziókban. A dimenzionális redukció hasonlóan történik, mint a mértékelméletekben, itt is bizonyos szimmetriákat rónak ki a fizikai terekre az extra dimenziókban. Végül ezzel kapcsolatban szeretnénk megemlíteni, hogy az általános relativitáselméletben is fölléphet a dimenziók redukálódása. *Perjés* mutatta meg [22], hogy stacionárius esetben (tehát időszerű Killing-vektor megléte esetén) a vákuum Einstein-egyenletek egy „háromdimenziós relativitáselméletté” redukálódnak, és a háromdimenziós térben „anyagi” terek jelennek meg.

A Weinterg—Salam-modell levezetéséhez (pontosabban csak annak bozonikus részéhez) egy olyan hatdimenziós téridőtől lehet kiindulni, amely $M^4 \otimes S^2$ topológiájú, ahol a „belső” gömb sugara R_0 . Ezen sokaság metrikája az extra két dimenzióban $SO(3)$ forgásszimmetriát mutat. A mértékterekről fölteszük, hogy szintén $SO(3)$ szimmetrikusak, s így a hatdimenziós Yang—Mills-hatás egy négydimenziós Yang—Mills—Higgs-hatássá redukálódik, ahogyan ezt általánosan belátjuk az értekezésben. Ha most megköveteljük, hogy egy $SU(2) \times U(1)$ mértékcsoporthoz akarunk a négydimenziós elméletben, akkor az eredeti mértékcsoporthoz csak $SU(3)$, $O(5)$ és a legkisebb kivételes Lie-csoport, G_2 , közül lehet valamelyik. Ebben a modellben csak két szabad paraméter szerepel, a hatdimenziós elmélet csatolási állandója és az S^2 gömb sugara: R_0 . Az eredeti Weinterg—Salam-modellben négy szabad paraméter van g , θ_W , M_W , M_H , amelyek rendre az $SU(2)$ csatolási állandó, a Weinberg-szög, a W -bozon és a Higgs-bozon tömege. A g csatolási állandó és az elektron töltése, $-e$ között fönnáll a következő összefüggés: $e = g \sin \theta_W$. A W -bozon tömege pedig a Fermi csatolási állandóval (G_F) hozható kapcsolatba: $M_W^2 = g^2 / \sqrt{32} G_F$.

A hatdimenziós elmélet szabad paramétereit rögzítsük úgy, hogy e -re és G_F -re a kísérletivel egyező értéket kapjunk. Ekkor két jóslat adódik: θ_W konkrét értéke, és az, hogy a Higgs-részecske tömege megegyezik semleges közvetítő Z -bozon tömegével. θ_W értéke csak a kiindulási mértékcsoporthoz megválasztásától függ. A három lehetséges csoport $SU(3)$, $O(5)$, G_2 esetén θ_W rendre 60° , 45° , 30° . A jelenlegi kísérleti érték [23] $\sin^2 \theta_W = 0,23 \pm 0,02$, így G_2 tűnik a legjobb választásnak. Az R_0 sugár (az extra dimenziók mérete) $R_0 = \sqrt{2} \hbar c / M_H$, szokásos mértékegységben $R_0 \sim 3 \cdot 10^{-16}$ cm, ami bizonyos értelemben nagyon nagy. Mint azt már említettük, a hatdimenziós $M^4 \otimes S^2$ sokaság az Einstein—Yang—Mills-egyenletek egy megoldása, de ekkor az R_0 sugár 10^{-33} cm nagyságrendű. Így a fönti modell nem kompatibilis jelenlegi formájában a hatdimenziós Einstein-egyenletekkel. A másik probléma az, hogy a fermionok sincsenek beépítve az elméletbe. Az is súlyos kifogás, hogy a kvantumelméletben korántsem világos, hogy mi a jelentése egy szimmetria ansatznak, mert a kvantumfluktuációkat nem lehet önkényes módon bizonyos előírt formák közé szorítani.

Így az ismertett modell még nem mondható realiztikusnak, de mindezek ellenére figyelemre méltó az az eredmény, hogy az eddig ad hoc módon bevezetett Higgs-terek geometriai módon jelentek meg, s a csatolásokat sem kellett önkényesen beállítani, mert azok teljesen meghatározottak.

Függelék

Itt most részletesen analizáljuk a második kényszeregyenletet, (4.35), ami szükséges ahhoz, hogy a szimmetrikus mértékpotenciálok az S/R faktortéren jól definiáltak legyenek. Azt már föltételeztük, hogy mind a \mathcal{T}^n , mind a $-\Phi_n^a T^a$ generátorok $n > N'$ esetén generálják R -t, mint S , illetve G egy alcsoportját. A (4.35) kényszeregyenlet

$$f_{mnp} \Phi_p^a + g^{abc} \Phi_m^b \Phi_n^c = 0, \quad \forall m, \forall n > N' \quad (\text{F.1})$$

átírható a következőképpen:

$$M'_{mp} \Phi_p^a = \Phi_m^b M''^{ba}, \quad (\text{F.2})$$

ahol az M' és az M'' mátrixok az R Lie-algebrájának egy-egy ábrázolását szolgáltatják:

$$\begin{aligned} M'(\mathcal{T}_n)_{mp} &= -f_{nmp}, \quad \forall n > N' \\ M''(\mathcal{T}_n)^{ba} &= -g^{cba} \Phi_n^c, \quad \forall n > N' \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

M' természetes módon két ábrázolásra redukálódik: R adjungált ábrázolására, valamint R S/R fölötti indukált ábrázolására R adjungált ábrázolásának problémáját már megoldottuk azzal a föltevessel, hogy R a G egy alcsoportja, s ezért csak az (F.2) egyenletnek a faktortérre való megszorításával kell foglalkoznunk. M'' az R G fölötti indukált ábrázolása, s erre vonatkozóan nincsen megszorítás. Választhatunk olyan bázist, hogy mindkét reprezentáció irreducibilis komponenseire essen szét és az olyan irreducibilis komponenseknek megfelelő almátrixok, amelyek egynél többször fordulnak elő, megegyezzenek. M' , illetve M irreducibilis komponenseit jelöljük M'_i -vel, illetve M''_j -vel.

Tekintsük most egy (M'_i, M''_j) pár esetén az (F.2) egyenlet azon alterekre való megszorítását, amelyen ez a pár hat:

$$(M'_i)_{mp} \Phi_p^{(ij)a} = \Phi_m^{(ij)b} (M''_j)^{ba} \quad (\text{F.4})$$

Ha a $\Phi^{(ij)}$ mátrix nem eltűnő, akkor szükségszerűen mind sorai, mind oszlopai lineárisan függetlenek, különben M'_i vagy M''_j reducibilis lenne. Ha M'_i és M''_j dimenziója különböző, akkor $\Phi^{(ij)}$ zérus. Abban az esetben, ha M'_i és M''_j ugyanolyan dimenziójú, de különböző irreducibilis ábrázolás, $\Phi^{(ij)}$ akkor is eltűnik, hiszen (F.4) alapján M'_i -t és M''_j -t egy bázistranszformáció köti össze. Végül, ha M'_i és M''_j ugyanazon ábrázolás azonos mátrixokkal, akkor (F.4) azt jelenti, hogy $\Phi^{(ij)}$ az M'_i ábrázolás valamennyi mátrixával kommutál. Ekkor a Schur-lemma alapján:

$$\Phi^{(ij)} = \Phi^{(ij)}(x) \mathbf{1}, \quad (\text{F.5})$$

ahol $\varphi^{(ij)}$ egy tetszőleges függvény.

Tehát arra a következtetésre jutottunk, hogy minden (M'_i, M''_j) irreducibilis párnak megfelel egy $\varphi^{(ij)}(x)$ Higgs-tér komponens, ha M'_i és M''_j megegyezik, az összes többi Higgs-tér komponens eltűnik.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁSOK

Szeretnék köszönetet mondani a Központi Fizikai Kutató Intézet Részecske- és Magfizikai Kutató Intézetének a számomra nyújtott doktori ösztöndíjért, és különösképpen Szabó Ferencnek, támogatásáért.

Hálás vagyok témavezetőmnek, Hraskó Péternek, valamint az RMKI Elméleti Osztályán dolgozó kutatóknak, főképpen Perjés Zoltánnak munkámat segítő hasznos észrevételeiért.

Szeretném köszönetemet kifejezni az École Normale Supérieure Elméleti Fizikai Osztályának (Laboratoire de Physique Theorique de l'École Normale Supérieure) ahol 1978—1979-ben 10 hónapot tölthettem és együttműködhettem Nicholas Mantonnal.

Végül köszönet illeti Gulyás Jánosné, a kézirat gépeléséért.

IRODALOM

1. R. Utiyama, Phys. Rev. 101, 1592, 1956
T. W. B. Kibble, J. Math. Phys. 2, 212, 1961.
M. Carmeli, Gen. Rel. Grav. 3, 317, 1972.
Y. M. Cho, Phys. Rev. D 14, 3341, 1976.
2. J. L. Gervais and A. Neveu, Phys. Rep. 23C, 237, 1976.
R. Rajaraman, Phys. Rev. 21C, 227, 1975.
3. R. F. Dashen, B. Hasslacher, A. Neveu, Phys. Rev. D. 10, 4114, 1974, ibid. 11, 3424, 1975, ibid. 12, 2443, 1975.
4. A. M. Polyakov, Phys. Lett. 59B, 82, 1975.
5. G. 't'Hooft, Phys. Rev. D 14, 3432, 1976.
A. Belavin, A. M. Polyakov, Nucl. Phys. B123, 429, 1977.
6. G. 't'Hooft, Nucl. Phys. B79, 276, 1974.
A. M. Polyakov, JEPT. Lett. 20, 194, 1974.
7. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. Schwartz, Y. Tyupkin, Phys. Lett. 59B, 85, 1975.
8. E. Witten, Phys. Rev. Lett. 38, 121, 1974.
9. A. Frenkel, P. Hraskó, Ann. Phys. (N. Y.) 105, 288, 1977.
10. P. Forgács, N. S. Manton, Comm. Math. Phys. 72, 15, 1980
11. K. Yano, The Theory of Lie Derivatives and its Application, Interscience, 1957.
12. M. Lohe, Phys. Lett. 70B, 325, 1977.
13. D. Olive, Nucl. Phys. B153, 1, 1979.
14. P. G. Bergmann, E. J. Flaherty, J. Math. Phys. 19, 212, 1978.
J. Harnad, S. Shnider, L. Vinet, J. Math. Phys. 20, 931, 1979.
H. C. Wang, Nagoya, Math. J. 13, 1, 1958.
15. N. S. Manton, Nucl. Phys. B126, 525, 1977.
16. N. S. Manton, Nucl. Phys. B158, 141, 1979.
17. Th. Kaluza, Sitzungber. Preuss. Akad. Wiss., Berlin Math. Phys. K1. 966, 1921.
O. Klein, Z. Physik 37, 895, 1926. Nature, 118, 516, 1926.
18. J. Scherk, J. H. Schwarz, Phys. Lett. 57B, 463, 1975.
19. E. Cremmer, J. Scherk, Nucl. Phys. B108, 409, 1976.
E. Cremmer, J. Scherk, Nucl. Phys. B118, 61, 1977.
20. J. F. Luciani, Nucl. Phys. B135, 111, 1978.
Z. Horváth, L. Palla, E. Cremmer, J. Scherk, Nucl. Phys. B127, 57, 1977.
Z. Horváth, L. Palla, Nucl. Phys. B142, 327, 1978.
P. Forgács, Z. Horváth, Gen. Rel. Grav. 10, 321, 1979, ibid. 11, 205, 1979.
21. F. Gliozzi, J. Scherk, D. Olive, Nucl. Phys. B122, 253, 1977.
E. Cremmer, B. Julia, Phys. Lett. 80B, 48, 1978
J. Scherk, J. H. Schwarz, Nucl. Phys. B153, 61, 1979.
22. Z. Perjés, Comm. Math. Phys. 12, 275, 1969, Magyar Fiz. Foly. 24, 173, 1976. (Kandidátusi ért.)
23. C. Baltay, Proc. of the Tokyo Conference 1978.

KÖNYVISMERTETÉS

D. H. Mayer: The Ruelle—Araki Transfer Operator in Classical Statistical Mechanics
Lecture Notes in Physics. 123. kötet. 154 oldal. 1980.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York

A Kramers—Wannier transzfer-mátrix módszer véges hatósugarú potenciálok esetén lehetővé teszi, hogy a rendszer szabad energiáját kifejezzük a mátrix fő sajátértékének segítségével. Innen például az egydimenziós esetben azonnal adódik, hogy a rendszerben nincs fázisátmenet, de e módszerből ered Onsager nevezetes kétdimenziós eredménye is. Egydimenziós, de végtelen hatósugarú potenciálokkal adott rendszerekre a Ruelle—Araki transzfer-operátor természetes általánosítása a Kramers—Wannier transzfer-mátrixnak. Exponenciálisan csökkenő kölcsönhatások esetére a szerző a R — A transzfer-operátor teljes spektrális jellemzését tudja adni, amelyből a korreláció viselkedése is meghatározható. Lassabban csökkenő potenciálok vizsgálatánál azonban elvi nehézségek merülnek fel (az operátor nyoma nem véges, így a szabad energiára használt összefüggés értelmét veszti), jóllehet ad hoc módszerek ilyen potenciáloknál is működnek: pl. Dobrusin valószínűségi módszerrel bizonyította, hogy a szabad energia és a korreláció analitikus, feltéve, hogy a $J(i)$ pár-kölcsönhatás a végtelenben úgy viselkedik, mint $1/i^m$, ($m \geq 3$). Jelen mű fő célja egydimenziós, exponenciálisan csökkenő kölcsönhatások vizsgálata a R — A transzfer-operátor módszerrel, valamint a módszer jelenlegi határainak diszkussziója. Kiegészítésül ugyanezekre a kölcsönhatásokra bevezeti és jellemzi a Ruelle-féle ζ -függvényeket. Klasszikus, diszkrét és folytonos spinű valamint folytonos, kemény-mag potenciállal adott rendszerek példái szerepelnek. A könyv tanulmányozását ajánljuk mindazoknak, akik érthető bevezetést kívánnak nyerni a transzfer-operátorok módszerébe.

Sz. D.

L. Garrido (eds): Systems Far from Equilibrium
Proceedings, Sitges 1980.
Lecture Notes in Physics. 132. kötet
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York

Az 1980 júniusában megrendezett Sitges Conference on Statistical Mechanics, amelynek elnevezése egyben e kötet címét is adja, témáiban az 1978-as Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems nyári iskola folytatásának is tekinthető. Ezúttal 14 nagy előadás hangzott el, és ugyancsak 14 szemináriumi előadás. A kötet két szemináriumi előadás kivételével a konferencia teljes anyagát tartalmazza. Több előadás hangzott el a turbulencia jelenségéről (Mori—Fujisaka, Ahlers, Gollub), a nemlináris transzport elméletéről (Dorfman—Kirkpatrick, Zwanzig, Garcia-Collin, Brey), nem-egyensúlyi kritikus jelenségekről (Suzuki, Nicolis, Kawasaki—Onuki—Ohta). További témák: metastabilis állapotok kinetikája (Langer), spinodális dekompozíció (Binder) Fokker—Planck-egyenletek (Garrido—Llosa), információelmélet és ökológiai diverzitás (Lurié—Wagensberg). A szemináriumi előadások ezekhez a témákhoz kapcsolódtak.

Sz. D.

Ju. I. Szirotin, M. P. Saszkoljszkaja:
Osznovü krisztallofiziki
Izd. Nauka, Moszkva 1979.

A kristályok mind szélesebb körű alkalmazása felkeltette az érdeklődést a kristályfizika iránt. Az elmúlt negyedszázadban számos, a kristályok fizikai tulajdonságaival foglalkozó könyv jelent meg, mégis hiányzott egy olyan könyv, amely olyan részletességgel foglalkozna a kristályfizikával, mint Woldemar Voigt klasszikus műve, a „Lehrbuch der Kristallphysik” (első kiadása 1910). Sziro-

tin és Saszkoljzkaja ezért egy átfogó és ugyanakkor részletekbe menő könyv megírását tűzte ki célul, vállalva annak esetleges veszélyét is, hogy a könyv kevésbé lesz alkalmas kezdők számára. Hogy ezt a veszélyt sikerült mégis többé-kevésbé elkerülni, az a szerzők több évtizedes pedagógiai tapasztalatának köszönhető.

A 639 oldalas könyv tíz fejezetből áll. Az egyes fejezetek címei: I., A kristálytan alapfogalmai; II., Koordináta-rendszerek, vektorok és tenzorok; III., Bevezetés a kristályfizikába. A kristályok elektromos és hőtani tulajdonságai; IV., A kristályok optikai sajátosságai; V., Magasabb rendű tenzorok szimmetriája; VI., A kristályok rugalmassága; VII., A kristályok termodinamikája; VIII., A mágneses szimmetria a kristályfizikában; IX., Magasabb rendű effektusok; X., A kristályfizika néhány általános problémája.

A könyv sok hasznos táblázatot tartalmaz, közülük több, például az invariáns tenzorok táblázata, először kerül közlésre. Számos hivatkozás és tárgymutató teszi a könyvet jobban használhatóvá.

A könyv legnagyobb érdeme egyetemessége. A szerzők a kristályfizikának mind klasszikus fejezeteit, mind újabb felfedezéseit részletesen tárgyalják. Például a piezoelektromos effektus tárgyalása, éppúgy mint a második felharmonikus keltésének tárgyalása megtalálható benne. A könyv nagy előnye, hogy a kristályfizika megértéséhez szükséges kristálytani fogalmak és matematikai módszerek ismertetését is tartalmazza. Így az olvasó nem kényszerül más segédkönyvek használatára, s önállóan elsajátíthatja a kristályfizikai számítások módszerét. A könyv több olyan fontos problémát is tárgyal, amelyek eddig még sehol sem kerültek kifejtésre. Ilyen probléma például a különböző kristályok tenzoriális tulajdonságainak összehasonlíthatósága.

Kár, hogy a könyv mérései nem tették lehetővé a kristályfizikai mérési módszerek ismertetését is. Sajnálatos, hogy a második, átdolgozott kiadásban is maradt néhány sajtóhiba.

A könyv melegen ajánlható mindazoknak, akik kristályfizikával illetve a kristályok technikai alkalmazásaival foglalkoznak.

Hartmann Ervin

**R. Glowinski and J. L. Lions (eds):
Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, 1977.**

I. kötet: Lecture Notes in Mathematics 704.

II. kötet: Lecture Notes Physics 91.

Springer, Berlin, 1979.

A hasonló nevű konferencia, melynek előadásai a két kötet alapját képezik, 1977. december 5. és 9. között került megrendezésre Párizsban. A kétféle (az első kötet matematikai, a második kötet fizikai) sorozatban való megjelentetésből nem következik, hogy a konferencia témája mereven matematikai és fizikai jellegű előadások tevődött volna össze. Ténylegesen mindkét kötet tartalmaz olyan közleményeket, melyeket a fizikusok haszonnal forgathatnak, és ugyanez a gyakorlati matematikusra is igaz.

Tartalmi szempontból a két kötet olyanok számára hasznos, akik a fizikai vagy mérnöki feladatoknál előforduló — különféle parciális differenciálegyenletek numerikus megoldásával foglalkoznak. Látszatra ettől eltér a lineáris algebra vagy a szélsőérték-feladatok témája — ezekre is találunk példát a dolgozatok között — mégis, ezek a módszerek ide is tartozhatnak, mert a differenciálegyenleteket leggyakrabban lineáris albegrei egyenletrendszerekre, vagy ritkábban szélsőérték-feladatokra szokták visszavezetni.

Fizikai, ill. mérnöki nézőpontból a következő témák fordulnak elő: izochór feszültségterek, örvényáramok, Sommerfeld sugárzási feltétel, evolúciós folyamatok, a Hamilton-elv speciális alkalmazása a szerkezet-dinamikában, bifurkáció, nemlineáris rugalmasságtan, a képlékenység modellezése, transzportegyenletek, folyadékmechanika, aerodinamika, több fázisú áramlások, meteorológia, óceánográfia, plazmafizikai egyenletek.

A gyakorlati matematikus szempontjából előforduló témák: nagy lineáris egyenletrendszerek, feltételes optimalizáció, komplementaritási feladatok, véges elem módszerek, véges differencia módszerek. Külön érdeklődésre számot tartó cikkek foglalkoznak a homogenizáció kérdésével: itt a matematikai feladat olyan lineáris parciális differenciálegyenletek megoldása, ahol az együttthatók igen erősen oszcilláló függvények.

A cikkek java része angol nyelvű, 46 cikkből 11 cikk azonban francia nyelven íródott.

Hegedűs Csaba

Neumann János: A kvantummechanika matematikai alapjai
Akadémiai Kiadó, 1980.

Neumann János e művét 1932-ben adta ki a Springer-Verlag. Azóta majdnem ötven év telt el, de a mű változatlanul alapvető és aktuális. Célja a kvantummechanika matematikai szempontból szigorú ismertetése. Nem foglalkozik a kvantummechanikai módszerek speciális problémákra való alkalmazásával, erre a célra egy sor egyéb kézikönyv használható.

A könyv bevezető fejezete röviden vázolja a kvantummechanika első megfogalmazásait, a Heisenberg—Born—Jordan-féle mátrixmechanikát és Schrödinger hullámmechanikáját. Két különböző módon tárgyalja a kétféle elmélet ekvivalenciáját: megvilágítja a Dirac—Jordan féle általános transzformációelméletet, amelynek kiépítésében azonban meghatározó szerepet játszanak az általánosan használt matematikai módszerek területén kívül eső, „illetlen” függvények ($\delta(x)$). Ezért a két elmélet egyesítésének másik, Schrödingertől származó eljárását részesíti előnyben. Ez az absztrakt Hilbert-tér fogalmán alapszik, ez szolgáltatja a kvantummechanika kezeléséhez szükséges matematikai alapot. A II. fejezet a Hilbert-tér, és a Hilbert-téren értelmezett operátorok pontos vizsgálatát tartalmazza. A II. fejezet a kvantummechanika statisztikus értelmezésével foglalkozik. Itt a hullámmechanikai leírás szolgál alapul. Részletes analízist nyújt több mennyiség egyidejű méréséről és a határozatlansági relációkról. Gyakorlati alkalmazásként megmutatja, hogy az elektromágneses sugárzáselméletben hogyan számíthatók ki az átmeneti valószínűségek a statisztikus állításokból.

A IV. fejezet a statisztikus elmélet deduktív felépítését tárgyalja, az V. fejezet a statisztika és termodinamika viszonyával foglalkozik. A befejező VI. fejezetben a mérési folyamat vizsgálata található. Alapvető probléma a megfigyelt rendszer és a mérőberendezés egyesítése. Egy érdekes konklúzió, hogy a „rejtett paramétereken” alapuló okfejtés, amely a kvantummechanika statisztikus jellegéből a természet leírásában bizonyos többértelműségre (nem teljes leírásra) következtet, összeegyeztethetetlen a kvantummechanika alapfeltevéseivel.

Gálfi László

R. F. Willis (ed.): Vibrational Spectroscopy of Adsorbates
Springer Series in Chemical Physics 15

A szilárd testek felületének és az abszorbeált molekuláknak rezgési tulajdonságairól szerzett ismereteink az utóbbi néhány évben lényegesen bővültek. Ennek egyik oka az, hogy ma már nagyszámú kísérleti módszer áll rendelkezésünkre, melyek felbontása és érzékenysége egyre jobb. Másrészt alapvető előrehaladás történt elméleti vonatkozásban is.

Néhány évvel ezelőttig az abszorbeált molekulák rezgési tulajdonságainak felderítésére majdnem kizárólag infravörös transzmissziós spektroszkópiai módszereket használtak. Az utóbbi időben azonban — szinte egyszerre — több új eljárást is bevezettek. Ezek aszerint csoportosíthatók, hogy milyen sugárzással vizsgálják az anyagot: elektron, semleges részecske, vagy foton sugárzással. Az első kategóriába az elektron-energia-vesztés spektrószkópia (EELS) és a rugalmatlan elektron tunneling spektroszkópia (IETS) tartozik. A második csoportba a rugalmatlan neutron-szórás (NIS) és a rugalmatlan atom-szórás (AIS) módszere sorolható. Az optikai eljárások közé tartozik az infravörös reflexiós, abszorpciós spektroszkópia (IRAS) és a felületi Raman-spektroszkópia (SERS).

Elméleti vonatkozásban a felület-fizika és felület-kémia területén alapvető fontosságúvá vált a felületi rezgési módusok vizsgálata.

Az új kísérleti és elméleti eredmények összefoglalása érdekében 1979 decemberében előadás-sorozatot rendezett az Institute of Physics Vékonyréteg és felületek szekciója a Cavendish Laboratóriumban. Az összeállítás célja az volt, hogy különböző témákkal foglalkozó specialisták megismerkedjenek egymás munkájával. Mivel a módszerek számos tudományterületet érintenek, hasznosnak tűnt az előadások anyagának írásos formában történő rögzítése. A rendezvényen elhangzott tizenegy előadás szövegét tartalmazza a *Vibrational Spectroscopy of Adsorbates* című kötet. Az előadók célja nem az volt, hogy részletes összefoglalókat tartsanak, hanem sokkal inkább az, hogy bemutassák az egyes módszerek elvi alapját, a jelenlegi problémákat, és vázolják a fejlődés várható irányait. Konkrét fizikai rendszereket is csak illusztrációs céllal tárgyalnak.

A kiadvány megismerteti az olvasót az abszorbeált molekulák rezgési tulajdonságainak legmodernebb kutatási módszereivel.

Tél Tamás

J. Brey—R. B. Jones (editors): Critical Phenomena
Sitges International School of Statistical Mechanics, June 1976.
Sitges, Barcelona. Lecture Notes in Physics, Vol. 54
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1976.

A fizikusok és a fizikai folyóiratok számának gyors növekedése miatt — különösen a kezdő kutatóknak — egyre nehezebb nyomon követni egy-egy tématerület eredményeit, fejlődését. Ezért lettek közzéadva a speciális „iskolák”, ahol egy téma ismert művelői adnak összefoglaló áttekintést a tudományterület legújabb eredményeiről; ezért közzéadva az ilyen „postgraduális” iskolák anyagát közreadó kötetek, amilyen a „Lecture Notes” 54. kötete is. A Sitges-iskolán a kritikus jelenségek fizikájának specialistái adtak elő. Íme:

F. J. Wegner: Kritikus jelenségek és a skála-invariancia.

M. S. Green: A renormalizációs csoport invariancia-tulajdonságai.

Shang-Keng Ma: Skála-transzformációk a dinamikai modellekben.

C. P. Enz: Kritikus dinamika a Fokker-Planck-formalizmusban.

P. Szépfalussy: A kritikus folyamatok dinamikája és a renormalizációs csoport. — Alkalmazás a dinamikai rács-modellre.

R. Haag: A kvantum-statisztikus mechanika algebrai alapjai. Egyensúlyi állapotok és a stabilitás hierarchiája.

S. Miracle-Solé: A fázisátalakulásokra vonatkozó tételek és az Ising-modell.

J. L. Lebowitz: Az egyensúlyi rendszerek statisztikus mechanikája: néhány egzakt eredmény.

G. Gallavotti: Valószínűségi megfontolások a kritikus fluktuációkkal kapcsolatban.

L. P. Kadanoff: A renormalizációs csoport technikájának alkalmazása kvarkokra.

R. Brout: A spontán szimmetria-sértés szerepe.

A könyv kiváló szakemberek kiváló előadásait tartalmazza. A szerzők (és szerkesztők) feltételezik, hogy az olvasó jól ismeri a kritikus jelenségek elméletének (a kvantum- és statisztikus fizikának, a csoportelméletnek) az alapjait. A recenzens a kezdőknek azt javasolja, hogy „előkészítéssel” tanulmányozzák át a Sitges-iskola egyik előadásának (s így a kötet egyik szerzőjének), *Shang-Keng Ma*-nak brilliánsan megírt könyvét: *Modern Theory of Critical Phenomena* (W. A. Benjamin, Inc., London, 1976).

(Szabó János)

L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw (editors):
Turbulent Shear Flows 2 Selected Papers from the Second International Symposium on
Turbulent Shear Flows, Imperial College London, July 2—4, 1979.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1980.

A kötet a londoni konferencián elhangzott előadások egy részét adja közre, a diszkusszió alapján bővített, átdolgozott formában. Az anyagot a szerkesztők a következő témák szerint csoportosították: a turbulens áramlás matematikai modelljei (Turbulence Models); kétdimenziós réteges áramlások merev falak mentén (Wall Flows); recirkulációs és háromdimenziós turbulens áramlások (Complex Flows); koherens struktúrák (Coherent Structures); környezeti áramlások (Environmental Flows).

Nagyon hasznosak és tanulságosak egyes fejezetek élén álló „bevezető megjegyzések”. Néhány évvel ezelőtt egyes kutatók a turbulencia „univerzális” medelljéről cikkeztek. Tudjuk: derűlátásuk (és szóhasználatuk) elhamarkodottnak bizonyult. A fejezeteket bevezető megjegyzések segítenek eligazodni a különböző típusú közelítések érdekében, igyekeznek körülhatárolni az egyes modellek alkalmazhatósági tartományát, rávilágítanak a modellek kapcsolatára. Ezáltal lesz a könyv tartalma többé-kevésbé egységes, az alfejezetek témájának és tárgyalásmódjának sokfélesége ellenére.

Szabó János

Enrique Sanchez-Palencia: Non-Homogeneous Media and Vibration Theory
Lecture Notes in Physics, 127. pp. 398.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1980.

A recenzens szükségesnek véli eloszlatni a könyv címe olvastán esetleg adódó tanácstalanságot. A kötet tartalma: diszkrét és folytonos spektrumú operátorok spektrális tulajdonságai, és inhomogén közegek homogenizációjának (vagyis az intenzív mennyiségek inhomogenitása okozta transzportfolyamatok) elmélete.

Az első részt a szerző bevezetőnek szánja azoknak az olvasóknak, akik „a téma matematikai és fizikai alapjaiban kevésbé járatosak”. A recenziens azonban úgy véli, hogy a témában „járatos” olvasó számára is tanulságos a „bevezetőnek” szánt első rész, minthogy rendkívül tömören foglalja össze a témára vonatkozó matematikai tudnivalókat. Íme a fejezetcímek: Disztribúciók és a Szoboljev-terek. Banach-térbeli operátorok. Példák peremérték-feladatokra. Félcsoportok és a Laplace-transzformáció.

A könyv további — fizikai problémákat tárgyaló — fejezeteiben is lenyűgöző a tárgyalásmód tömörsége, a matematikai precizitás, az ismertetett anyag rendkívüli bősége. Különösen tanulságos és gondolatébresztő a vonatkozó szakirodalom kritikai elemzése. Matematikus olvasók számára „megnyugtató”, de az elméleti fizikus olvasók számára sem kevésbé hasznos, hogy a kötet csaknem mindegyik fejezetének van „A konvergencia bizonyítása” című alfejezete. (Sapientia sat.)

Részben az érdeklődés felkeltése végett, részben a tartalom bőségének illusztrálására álljon itt a tartalomjegyzék néhány (önkéntesen kiragadott) alfejezetének a címe: Homogenizáció viszkoeelasztikus közegekben. Hanghullámok porózus közegekben. Összenyomható, viszkózus folyadékok keveredése. — A Trotter—Kato-féle teorema. Diszkrét sajátértékű operátorok. Megjegyzések a hiperbolikus differenciálegyenletekre vonatkozólag és a Fourier-transzformáció. A Neumann- és a Dirichlet-féle probléma.

Ezek után talán már felesleges is leírni: a könyv minden elméleti fizikusnak, lineáris terekkel, operátorokkal és parciális differenciálegyenletekkel foglalkozó matematikusoknak hasznos (és élvezetes) olvasmány.

Szabó János

**P. A. Libby—F. A. Williams (editors): Turbulent Reacting Flows
Topics in Applied Physics, vol. 44.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1980.**

Sokszor leírták már, és a mondat állítása ma is érvényes: a turbulencia a kísérleti és elméleti fizika „fehér foltja”. Pedig se szeri — se száma a turbulenciával, a lamináris és turbulens áramlás közötti átmenettel foglalkozó könyveknek, konferenciáknak és szakcikkeknek. A forrásmentes, „tisztá” turbulens áramlás elméletének a kidolgozása is várat magára. Mennyivel bonyolultabbak a folyamatok, ha a turbulens áramlási térben kémiai reakciók is lejátszódnak! Pedig ezek a folyamatok képezik alapját a robbanómotorok, a JET-hajtóművek, a turbógenerátorok működésének. Ezen a területen a gyakorlat messze előtte jár az elméletnek.

A könyv célja, hogy a rendkívül komplex témakörre vonatkozó elméleti és kísérleti eredményekről áttekintést adjon. Paul A. Libby és Forman A. Williams (a kötet szerkesztői) írják a könyv bevezetőjében: „A termokémiai turbulens áramlás („turbulent reacting flow”) témája olyan forrongó állapotban van, hogy az áramlástanban, az aerotermokémiában járatos kutató is nehezen tekintí át és érti meg a turbulens égés folyamatát és azt, hogyan és milyen mértékben vagyunk képesek „megjósolni” a kémiai reakciókkal egybekötött turbulens áramlás struktúráját. Ez adta az indítékot a témakört átfogó könyv megírására.”

Az első fejezet (szerzői P. A. Libby és F. A. Williams) a termokémiai turbulens áramlás megértéséhez szükséges hidrodinamikai, reakciókinetikai, termokémiai tudnivalók briliáns összefoglalása.

A témakör gyakorlati kérdéseivel foglalkozik a második fejezet (A. M. Mellor, C. R. Ferguson); címe: A termokémiai turbulens áramlás gyakorlati problémái. (Kvázistacionárius lángok. Gázturbinák. Belső égésű motorok.)

A termokémiai turbulens áramlás struktúrája lényegesen függ attól, hogy a kémiai reagens állandóan jelen van-e az áramlási térben vagy folyamatosan juttatjuk-e a reakció-térbe. Ez a témája a harmadik (R. W. Bilger) és a negyedik fejezetnek (K. N. C. Bray). Néhány alfejezet-cím illusztrálhatja, hogy a fejezetek tartalma a gyakorlati és elméleti szakemberek érdeklődésére egyaránt számot tart: A reakció-hányad. A homogén turbulencia alkalmazása. A reakció-zóna szerkezete. A láng gerjesztette turbulencia. A turbulens keverés szabályozta égés. A lángterjedés turbulens tartománya.

A könyv ötödik fejezete (E. E. O'Brien) különösen a turbulencia és a reakció-kinetika elméletével foglalkozó kutatóknak tanulságos ismereteket tartalmaz; címe: „A termokémiai turbulens áramlás leírása valószerűség-sűrűség függvény segítségével.”

„Perspektívák és kutatási irányok” a címe a könyv utolsó, hatodik fejezetének. (P. A. Libby, F. A. Williams.) A téma komplexitása és elméletének kidolgozatlansága miatt a szerzők a fejezetet figyelemfelkeltésre szánták, és döntő mértékben problémafelvetésre szorítkoztak. Íme néhány ilyen probléma: a turbulens áramlás kialakulása; a kémiai reakciók kinetikája turbulens áramlásban;

a sugárzásos energiaátadás turbulens áramlásban; kétfázisú turbulens áramlás; hangsebességnél nagyobb sebességű áramlás; stb.

A recensens nemcsak azért ajánlja a könyvet a téma iránt érdeklődő mérnökök, fizikusok és fizikokémikusok figyelmébe, mert igen jó áttekintést ad a termokémiai turbulens áramlásokra vonatkozó elméleti és kísérleti eredményekről, hanem azért is, mert energiakritikus korszakunkban a gépek hatásfokának akár tizedszázalékos növelése, környezet-szennyezte Földünkön az égéstermékben a káros, mérgező összetevők arányának akár néhány ezrelékes csökkentése több, mint kívánatos.

Szabó János

W. Nörenberg—H. A. Weidenmüller: Introduction to the Theory of Heavy-Ion Collisions
Lecture Notes in Physics, 51
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1976.

A nagyenergiájú nehézion-reakciók lényegesen bővítették, mélyítették az atommagra, az erős kölcsönhatásra vonatkozó ismereteinket. Gondoljunk például a szupernehéz elemek felfedezésére (és meglepően nagy élettartamukra), a nagy impulzusmomentumú állapotok felismerésére vagy a nehézionok kiváltotta lökéshullámokra. Nem kevésbé érdekesek a nehéz-ionatom-ütközések, ill. az ilyen ütközések kiváltotta folyamatok: a kvázionatomok képződése és röntgensugárzása, a spontán pozitron-keltés a szupernehéz kvázionatomok terében.

Ezekkel az utóbb említett folyamatokkal, a nehéz-ionatom-ütközésekkel a könyv csupán az utolsó, rövid fejezetben foglalkozik, témája tehát csaknem kizárólag a nehéz-ionatom-ütközések elmélete tömören és magas színvonalon. (A szerzők feltételezik, hogy az olvasó jól ismeri a kvantummechanika és magfizika alapjait.) A kötet fizikusok részére szervezett speciális vagy posztgraduális tanfolyam segédkönyveként kiválóan használható. A szerzők kerülnek a hosszadalmas levezetéseket; a fizikai megfontolásokra, az elméleti eredmények fizikai tartalmának a kifejtésére és a kísérleti ellenőrzés lehetőségére, ill. eredményeire helyezik a hangsúlyt.

A 273 oldalas könyv hatalmas ismeretanyagot tartalmaz. Íme a fejezetcímek: 1. Bevezetés. 2. nehézion-ütközések klasszikus elmélete (Rugalmas szórás. Mélyen rugalmatlan szórás.) 3. A nehézion-reakciók tulajdonságai. (A reakció-csatorna tulajdonságai. A hatáskeresztmetszet kvalitatív tulajdonságai. Nívósűrűség.) 4. A nukleáris szórás elméletének elemei. 5. Rugalmas szórás. (A rugalmas szórás félklasszikus elmélete. A rugalmas szórás optikai modellje. A diffrakciós modell. A lágy levágás modellje. Regge-pólusok.) 6. Coulombgerjesztés. (Kvalitatív megfontolások. Elsőrendű perturbáció. Magasabbrendű effektusok. Kvantummechanikai korrekciók. A Coulomb-gerjesztés detektálásának a módszerei.) 7. Rugalmatlan szórás. (Klasszikus megfontolások. Félklasszikus leírásmód. Csatolt csatornák. Lágú levágás és Regge-pólusok.) 8. Statisztikus elmélet. 9. Atomi effektusok az ion-atom-ütközésekben.

Az egyes fejezeteket bőszes, gondosan összeállított irodalomjegyzék zárja.

Szabó János

Frederik W. Wiegel: Fluid Flow through Porus Macromolecular Systems
Lecture Notes in Physics, 121. pp. 102.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1980.

A könyv tartalma nem a közetmechanikusok vagy az olajbányászok igényeihez igazodik elsősorban (ők is hasznos tudnivalókat találnak a kötetben); a szerző (és a recensens) a könyvet főleg fizikokémikusoknak és biofizikusoknak ajánlja. A tárgyalás is ennek megfelelően három — egymástól nem teljesen független, de mégis különálló — részre tagolódik. Az első rész a porózus közegben lejátszódó áramlás leírásmódjának az ismertetése. A tárgyalásmód fenomenologikus, de röviden vázolja a szerző a statisztikus fizikai és a fenomenológiai leírásmód kapcsolatát is. Bár a szerző a téma elméleti ismertetésére helyezi a hangsúlyt, nem mulasztja el a kísérleti és az elméleti eredmények összehasonlítását.

A második rész a téma fizikai-kémiai alkalmazásait ismerteti: a diffúziós együttható és a permeabilitás Einstein-féle összefüggése; diffúzió forgó mozgást végző porózus gömb belsejében; a transz-

lációs diffúzió általános elmélete; viszkózus folyadék áramlása véletlenszerű és Gauss-eloszlású delta-singularitások mentén; híg oldatok diffúziója porózus közegben.

A biofizikusoknak szánt harmadik rész bevezetőjében a biológiai membránok reológiai és diffúziós szempontból fontos tulajdonságairól olvashatunk: a membránok szerkezete, vastagsága, áteresztőképessége. Majd a Bretschger-féle áramlás ismertetése után a biológiai szempontból érdeke néhány diffúziós folyamat leírása következik. Különösen érdekes és tanulságos a szerves membránokon át lejátszódó diffúziós folyamatokra vonatkozó kísérletek ismertetése.

A porózus közegekben lejátszódó áramlások iránt jobban érdeklődő olvasónak a „Függelék” ad tanulságos vissza- és kitekintést. (Megtudhatjuk e fejezetből, hogy a hidrodinamikai permeabilitás fogalmát egyidejűleg — 1856-ban — H. Darcy és J. C. Maxwell vezette be.) Részletesen elemzi a függelékben a szerző a porózus közegekben áramlást leíró fenomenológiai egyenletek alkalmazhatóságának a feltételeit; vázolja a nem-lineáris effektusok szerepét. Röviden szól arról az általánosabb problémáról is, amikor a permeabilis közeg nem tekinthető merevnek, hanem az áramlás során maga is — rugalmas vagy rugalmatlan — deformációt szenved. A függeléknek talán legérdekesebb része a különböző statisztika szerint elosztott „szórócentrumok” mentén kialakuló áramlások leírása.

Szabó János

W. C. Reynolds, R. W. MacCormack (editors): *Seventh International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics. Proceedings, Stanford, 1980.*
Lecture Notes in Physics, Vol. 141.
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981.

A Stanfordi Egyetemen az Amerikai Űrkutatási Központ (NASA) támogatásával rendezett konferencia már a hetedik a numerikus módszerek áramlástani alkalmazásaival foglalkozó konferenciák sorában. Érdemes felidézni sorrendjüket: Novoszibirszk (Szovjetunió) 1969; Berkeley (USA) 1970; Párizs (Franciaország) 1972; Boulder (USA) 1974; Enschede (Hollandia) 1976; Tbiliszi (Szovjetunió) 1978; Stanford (USA) 1980.

A stanfordi konferenciának 288 résztvevője volt 17 országból. A „Lecture Notes in Physics” sorozat 141. kötete a konferencián elhangzott 4 plenáris és 68 szekcióelőadás szövegét tartalmazza az előadók nevének alfabetikus sorrendjében. Ez a sorrend csak első pillanatban meglepő. A nagyszámú előadás a téma oly széles spektrumát fogja át, hogy tematika szerint a csoportosításuk szinte lehetetlen. A recenzens sem tehet mást: a könyv tartalmának és tematikája sokrétűségének az illusztrálására kiragad néhány előadáscímet:

Bartels, F.: Viszkózus áramlás forgó, koncentrikus gömbfelületek között.

Bruslinszki, K. V., Szaveljev, V. V., Zujeva, N. M.: Magnetohidrodinamikai problémák stabilitásának numerikus analízise.

Deconick, H., Hirsch, C.: Hangsebességnél nagyobb sebességű áramlás számítása magasabb rendű véges elem-módszerrel.

Horinti, K., Kuwahara, K., Oshima, Y.: Elliptikus henger körül kialakuló kétdimenziós áramlás számítása diszkrétörvény-közelítéssel.

Korving, C.: Numerikus módszer a szabad felszín mentén haladó nyomáseloszlás hullámmellenállásának a számítására.

Morf, R. H., Ország, S. A., Meiron, D. I., Frisch, U., Meneguzzi, M.: Nagy Reynolds-számú áramlások analitikus szerkezete.

Rizsov, O. Sz., Zsuk, V. I.: Kölcsönható határrétegek stabilitása és szeparációja.

Sankar, N. L., Tassa, Y.: Egy algoritmus a szárnyprofil mentén kialakuló, transzszonikus, instacionárius, potenciális áramlások leírására.

Janyenko, N. N., Grigorjev, Y. N., Ivanov, M. S.: Ritka gázok áramlásának numerikus szimulációja.

Zhu, Y.-I., Chen, B.-m.: Alkalmas módszer a háromdimenziós áramlásokban kialakuló diszkontinuitások kölcsönhatásának a számítására.

Egy konferencia kiadványában természetes, hogy az egyes előadások színvonala, stílusa nagyon különbözik. Tömör elméleti fejtegetések, gondosan elemzett mérési eredmények, numerikus módszerek váltogatják egymást. Az áramlástannal foglalkozó kutatók mindegyike talál a kiadványban hasznos tudnivalót, és áttekintést nyer a numerikus módszerek áramlástani alkalmazásainak metodikájáról.

Szabó János

J. Jimenez (ed.): *The Role of Coherent Structures in Modelling Turbulence and Mixing. Proceedings, Madrid 1980. Lecture Notes in Physics, Vol. 136.*
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981.

A turbulencia-kutatás területén az utóbbi évek egyik legfontosabb eredménye az a felismerés, hogy a nagyskálájú struktúrák (távoli korrelációk) a legtöbb turbulens áramlásban fontos szerepet játszanak. Ez a felismerés — remélhetőleg — előbbre visz a turbulencia természetének a megértésében, s főleg a turbulencia kísérleti vizsgálatának adott impulzust. Az elméleti és kísérleti eredmények összhangjáról azonban még nem beszélhetünk. Indokolt tehát a konferencia (Madrid, 1980. június 25—27.) szervezőinek a célkitűzése: „Időszerű, hogy a kísérleti és az elméleti fizikusok közös konferencián diskutálják a turbulencia-kutatás területen elért eredményeket és megpróbálják felvázolni a jövő kutatás főbb irányvonalait.”

A könyv tartalma a konferencia szekcióüléseinek a témái szerint tagozódik: 1. Elmélet (6 előadás); 2. Kísérlet (4 előadás); 3. Kísérlet (4 előadás); 4. Alkalmazások (4 előadás).

A konferencia tematikáját (és a könyv tartalmát) illusztrálандó, idézzük *P. G. Saffmannak*, a konferencia tudományos bizottsága tagjának bevezető előadásából („Koherens struktúrák a turbulens áramlásban”) az alábbiakat:

„E konferencia fő célja annak megvizsgálása, vajon a koherens struktúrákon át eljutunk-e az ígéret földjére, vajon igazuk van-e azoknak, akik úgy vélik, hogy nem az energiaspektrumok, a korrelációk, a Reynolds-egyenlet, stb. statisztikus értelmezésének a segítségével, hanem determinisztikus megközelítéssel juthatunk el a turbulencia megértéséhez. Röviden: az örvény-dinamika adja-e a kulcsot a turbulencia-elmélet rég várt kidolgozásához?”

Izgalmas kérdések. A könyv szerzői (a konferencia előadói) nem titkolják, hogy nem ismerik a kérdésekre a végleges választ. A már idézett *P. G. Saffman* szerint „megzavarta a kutatókat az általános elméletek El Doradoja, és elhanyagoltuk az egyszerűbb részjelenségek alaposabb megértését”. Ilyen „részjelenségek” kísérleti vizsgálata, elméleti analízise és alkalmazása a könyv tárgya. Érdekes, hasznos — sőt izgalmas — olvasmány mindazoknak, akik áramlástannal, turbulenciával vagy nemlineáris effektusokkal foglalkoznak.

Szabó János

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat nyomdába érkezett: 1981. aug. 5. — Terjedelem: 8,75 (A/5 ív)

81-3797 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató

MAGYAR
 TUDOMÁNYOS AKADEMIA
 KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bata Lajos</i> : Nematikus és Szmeztikus-A szerkezetű folyadékkristályok mikrodinamikája.....	187
<i>Forgács Péter</i> : Téridő szimmetriák a mértékelméletekben.....	249

KÖNYVISMERTETÉS

<i>D. H. Mayer</i> : The Ruelle-Araki Transfer Operator in Classical Statistical Mechanics	279
<i>L. Garrido (ed.)</i> : Systems Far from Equilibrium	279
<i>Ju. I. Szirotin, M. P. Saszkoljszkaja</i> : Osznovü krisztallofiziki.....	279
<i>R. Glowinski and J. L. Lions (ed.-s)</i> : Computing Methods in Applied Sciences and Engineering	280
<i>Neumann János</i> : A kvantummechanika matematikai alapjai	281
<i>R. F. Willis</i> : Vibrational Spectroscopy of Adsorbates	281
<i>J. Brey—R. B. Jones (editors)</i> : Critical Phenomena	282
<i>L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw (editors)</i> : Turbulent Shear Flows 2	282
<i>Enrique Sanchez—Palenzia</i> : Non-Homogeneous Media and Vibration Theory	282
<i>P. A. Libby—F. A. Williams (editors)</i> : Turbulent reacting Flows	283
<i>W. Nörenberg—H. A. Heidenmüller</i> : Introduction to the Theory of Heavy—Ion Collisions ...	284
<i>Frederik W. Wiegell</i> : Fluid Flow through porous Macromolecular Systems.....	284
<i>W. C. Reynolds, R. W. MacCormack (editors)</i> : Seventh International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics	285
<i>J. Jimenez (ed.)</i> : The Role of Coherent Structures in Modelling Turbulence and Mixing.....	286

307.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

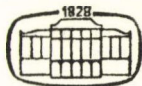
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratszfűzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratszfűzetekből évenként egy kötet jelenik meg hat sfűzetben, sfűzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak sedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

A ZENGŐSZOBAI MÉRÉSEK ÁLTALÁNOS PROBLÉMÁI*

ANGSTER JUDIT—MIKLÓS ANDRÁS—TARNÓCZY TAMÁS

MTA, Akusztikai Kutatólaboratórium

1. A zengőszobai mérések áttekintése

A hangforrások adatainak pontosabb megismerése, az építészeti akusztika technikai fejlődésének elősegítése, valamint a zajcsökkentési módszerek fejlesztése érdekében szükségessé vált a legkülönbözőbb hangforrások hangteljesítményének és dinamikájának mérése, továbbá különféle anyagok akusztikai jellemzőinek vizsgálata. A hangelnyelés-, illetve hangteljesítmény méréséhez többek közt az ún. diffúz hangtér kialakítása szükséges. A zárt diffúz hangtér gyakorlati megvalósítása a külső hanghatásoktól jól szigetelt zengőszoba.

A zengőszoba fizikai leírására kétféle módszer terjedt el.

a) A hagyományos leírás szerint [1], amelyet *W. C. Sabine*, majd *A. Jüger* (1911), illetve később *K. Schuster* és *E. Waetzmann* (1929), valamint velük csaknem egyidőben *R. F. Norris* (1929), majd *C. F. Eyring* (1930) dolgozott ki [2, 3], feltételezzük, hogy a zengőszobában kialakult hangtér tökéletesen diffúz, és mind a hangteljesítmény, mind pedig a hangelnyelési fok számítására elegendő egyetlen teremjellelmező, az utózengési idő.

A Sabine-féle közismert tapasztalati képlet szerint az utózengési idő és a terem adatai között a következő összefüggés áll fenn:

$$T = \frac{55,3 V}{c S \bar{\alpha}} \sim 0,16 \frac{V}{S \bar{\alpha}}, \quad (1)$$

ahol V = a terem térfogata [m^3],

$\bar{\alpha}$ = a terem falának átlagos elnyelési foka,

S = a terem falának felülete [m^2] és

c = a hang terjedési sebessége [ms^{-1}].

A képlet nem veszi figyelembe a terem alakját, azonfelül gyakorlatilag csak $\alpha \ll 1$ esetén (üres zengőszoba) ad jó közelítést. Nagy előnye viszont, hogy rendkívül könnyen kezelhető.

A Norris—Eyring-féle statisztikus levezetés [2, 3] figyelembe veszi a többszörös visszaverődéseket, továbbá egyszerűbb teremalakok esetén a terem alakját is.

$$\text{Az utózengési idő: } T = -k \frac{55,3 V}{c S \ln(1 - \bar{\alpha})} \text{ [s]}, \quad (2)$$

ahol k a terem alakjától függő állandó.

* Érkezett 1980. júl. 13.

Ha $\alpha \ll 1$ (üres zengőszoba), akkor (2) megegyezik a Sabine-féle képlettel, mérsékelt elnyelésű termekre viszont annál pontosabb [4].

A Kuttruff [5], illetve Carroll—Chien-féle [6] leírásmód nem tételez fel eleve térbeli diffuzitást, csupán azt, hogy a határfelületek, mint másodlagos források a rájuk eső hangenergiát a Lambert-féle második törvény szerint verik vissza, azaz a beeső sugár irányától függetlenül szórják szét [7]. Az elmélet bebizonyítja, hogy tökéletes diffúz hangtér még akkor sem létezhet, ha a falakon ilyen diffúz visszaverődést tételezünk fel [6]. Ugyanis ha azt tesszük fel, hogy a falra beeső hangintenzitás térben és időben állandó, vagyis

$$I(r', t) = I_0,$$

az elmélet szerint a hangforrás kikapcsolása után az intenzitást a következő integrál adja:

$$I(r, t) = \frac{I_0}{\pi} e^{-\frac{t}{T}} (1 - \alpha) \int_{S(r)} \frac{\cos \varphi \cos \varphi'}{R^2} dS, \quad (3)$$

ahol

$$\int_{S(r)} \frac{\cos \varphi \cos \varphi'}{R^2} dS$$

a geometriai elrendezéstől, vagyis a hangszóró, illetve a mikrofon helyétől függő tényező. Eszerint a Kuttruff-féle elmélettel együtt jár, hogy a mért utózengési időértékek még akkor is függenek a hangszóró, illetve a mikrofon helyétől, ha feltételezzük, hogy a hangtér diffúz.

b) A zengőszoba fizikai leírásának másik módszere, amikor a zárt teret teljesen visszaverő falú üregként kezeljük, és megoldjuk rá a háromdimenziós akusztikai hullámegyenletet. Valamely tetszőleges megoldás a sajátmegoldások lineáris kombinációjaként állítható elő. Ilyen módon valamely adott geometriai elrendezésre megkaphatjuk a teremráfelelési görbét. Az elmélet csak az $\alpha=0$ esetre szolgáltat zárt alakban kifejezhető megoldást [8, 9]. A veszteségek figyelembevételével meghatározott sajáthangok, illetve utózengési idők már csak közelítések [10, 11, 12]. Ez a leírási módszer korrekt, viszont rendkívül bonyolult.

Az elnyelési fok mérésének elméletében feltételezzük, hogy a hangtér diffúz. Az elnyelési fokot a következő képlettel számolhatjuk [13, 14]:

$$\alpha = 0,16 \frac{V}{S_e} \left(\frac{1}{T_e} - \frac{1}{T} \right), \quad (4)$$

ahol S_e = zengőszobába helyezett elnyelő anyag felülete [m^2],

T_e = a zengőszoba utózengési ideje, amikor az elnyelő anyag bent van [s], és

T = az üres zengőszoba utózengési ideje [s].

A nemzetközi szabványok [13] általában megkövetelik az elnyelésmérésekre szolgáló zengőszobák $V=180 \text{ m}^3$ alsó határát. Már korábban kimutattuk azonban [15], hogy egészen kisméretű zengőszobákban is a nemzetközi körméréseknek megfelelő eredményeket kapjuk, ha a teremrezonanciákat megfelelőképpen csillapítjuk. Annak idején egy 10 m^3 térfogatú teremben ezt úgy értük el, hogy a falakat megfelelően csillapított hajlítású rezgést végző lemezekből készítettük [16]. Ezt az eredményt

használtuk ki a jelenlegi $V = 129 \text{ m}^3$ térfogatú terem kisfrekvenciás hangterének megjavítására is.

Mind a nemzetközi [13], mind a magyar szabvány [14] megadja azt az alsó határfrekvenciát, ameddig az elnyelési fok méréseket „pontosan” lehet elvégezni. Ez a határérték

$$f_h = 125 \left(\frac{180}{V} \right)^{1/3} \text{ Hz.} \quad (5)$$

Esetünkben a határfrekvencia 140 Hz-nek adódik, azonban az említett mélyhangú módosító eljárással valamivel lejjebb tolódik.

A szabványos előírásoknak [17, 18] megfelelő hangteljesítmény-mérés elméletében feltételezzük, hogy a hangforrás által kisugárzott teljesítmény egyensúlyba kerül a falak elnyelésével (ez frekvenciasávonként külön-külön igaz). Így a teremadatok ismeretében, a hangtér egy pontjában mért intenzitásadatokból [1] számítható a hangforrás teljesítménye. Végül azt is feltételezzük, hogy a hangforrás által kisugárzott teljesítmény nem függ a teremtől, vagyis hogy a terem visszahatása elhanyagolható. Ilyen feltételek mellett a következő képlettel számolhatunk:

$$W = \frac{p^2}{4\rho c} \frac{0,16S}{TS - 0,16V} [\text{W}], \quad (6)$$

ahol a W teljesítményt wattokban, a p effektív hangnyomást [Pa]-ban mérjük.

A hangteljesítmény-mérésekre vonatkozó szabványok [17, 18] szerint a falak elnyelési foka nem haladhatja meg a 0,06 értéket. Kíváncsú a szabványok értelmében az is, hogy az

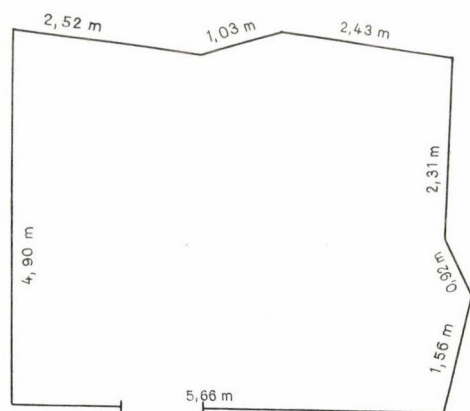
$$f_0 \sim \frac{2000}{\sqrt[3]{V}} \text{ Hz}$$

alatti frekvenciákon, esetünkben tehát 400 Hz alatt, a zengőszoba elnyelését növeljük. Az erre a célra alkalmazott megoldást a későbbiek során ismertetjük.

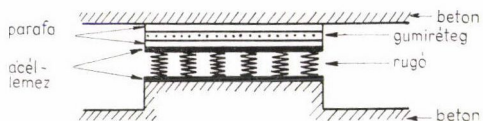
A mérések gyakorlati keresztülvitelekor pontosan kell ismernünk a zengőszobában kialakult hangtér tulajdonságait, és arra kell törekednünk, hogy a mérési körülmények lehetőleg megfeleljenek az elmélet követelményeinek. Dolgozatunkban azokat a vizsgálatokat ismertetjük, amelyek segítségével a zengőszoba hangterének különféle fizikai jellemzőit tisztáztuk, és a kapott eredményeket összehasonlítjuk az elmélet követelményeivel.

2. A mérőhelyiség külső zajok elleni szigetelése

A MTA Akusztikai Kutatólaboratóriumának zengőszobája (a diffuzorok beszámításával 129 m^3) belső térfogatú és 155 m^2 belső felületű betondoboz, amely akusztikailag szigetelten beton alapozaton nyugszik. Vázlatos belső alaprajzát és keresztmetszetét az 1. ábrán mutatjuk be. A testhang szigetelést nyolc rugós gerenda szolgálja, ezek fölépítése a 2. ábrán látható. A zengőszoba sajátfrekvenciája függőleges irányú rezgésre $\sim 3 \text{ Hz}$ [19].



1. ábra. A zengőszoba vázlatos alaprajza és keresztmetszete



2. ábra. A zengőszobát alátámasztó rugós gerenda fölépítése

A hangszigeteléssel szemben azt a követelményt támasztjuk, hogy minden körülmények között biztosítsa a zengőszobai mérések zavartalanságát. Ez a követelmény lényegében azt jelenti, hogy a jel-zaj viszonyoknak a szóba jövő 100 Hz-től 10 kHz-ig terjedő mérési tartomány minden egyes tercsávjában jobbnak kell lennie 60 dB-nél. Minthogy a zengőszobában általában sávonként 80–90 dB hangnyomásszintű jelekkel dolgozunk, az alaprajzra megengedhető legnagyobb szintre tercsávonként 20 dB adódik. E követelmény teljesítését alaprajz és hanggátlásméréssel egyaránt ellenőriztük. Mindkét mérést — a [19]-ben foglaltaktól eltérően — az újabban érkezett Brüel és Kjaer 2131 típusú azonos idejű elemzővel is elvégeztük, az átlagolást 128 s-ra állítva. Az alaprajz mérési eredményét az I. táblázatban közöljük. Mint ahogy várható, az alaprajz mély hangokon erősebb, közepes és magas hangoknál pedig közel állandó, és tercsávonként végig 10 dB abszolút szint alatt marad. Az összeállítás elektromos zaja is közel 10 dB/terc. Meghatároztuk a teljes sávra adódó szintértékeket is. Az alaprajz

lineáris állásban 1,4 Hz—20 kHz	53 dB
alulvágó szűrővel, a kisfrekvenciás (<22,5 Hz) összetevőket kiszűrve	31 dB
Az alaprajz A-szűrővel teljes sávban	23 dB
alulvágó szűrővel a kisfrekvenciás (<22,5 Hz) összetevőket kiszűrve	18 dB

Megállapítható tehát, hogy bár az infrahang tartományban az alaprajz elég jelentős, a zengőszoba mérési tartományában mindenütt megfelel a követelményeknek. Sőt, ilyen alacsony szintű alaprajzértékeket kevés zengőszobában lehet kimutatni. Ennek elsősorban az az oka, hogy a zárt zengőtérbe nincs

szellőző bevezetés. Az így szerzett előnyt, ami egyébként a hanggátlásban is megnyilvánul — némileg lerontja az a tény, hogy a hőmérsékleti és páratartalmi adatok állandósítása elég nehézkes és az ajtó kinyitásakor megváltozik.

A falak és az ajtó együttes hanggátlását úgy ellenőriztük, hogy az előtérben elhelyezett hangszóróra „rózsaszínű” zajt adva, megmértük a hangnyomásszintet a szobán kívül, illetve belül, az ajtótól 1—1 méter távolságban elhelyezett mikrofonokkal. A hangjeleket az azonosidejű elemzővel vizsgáltuk. A tercsávonként mért hangnyomásszintek különbségét a 3. ábrán mutatjuk be. Az így megfogalmazott „hanggátlás” 50—70 dB közé esik, tehát az előtérben általában mérhető zajok sem okoznak a zengőszobában 20 dB-nél nagyobb szintet az egyes tercsávkokban.

Az alkalmazott mérési módszer ugyan nem egyezik meg a szabványok előírásaival, de jól követi a gyakorlati eseteket, ezért eredménye kellőképpen jellemző a zengőszobai ajtók és falak együttes hanggátlására. Ez az érték teljes sávra átlagolva 50 dB, A-szűrővel mérve pedig 62 dB.

3. A falak és a levegő elnyelése

A zengőszoba utózengési idejét a szokásos módszerrel, és egy újabban kidolgozott korszerűbb módszerrel is többször megmértük. A szobahőmérsékleten és kb. 50 % páratartalom mellett kapott átlagos utózengésértékeket ábráztuk a frekvencia függvényében a 4. ábrán. A görbe kis frekvenciákon eltér a [19] cikkben közölt görbétől, amit az eltérő mérési körülmény, a régebbi mérések pontatlanabb volta, valamint a zengőszoba 160 Hz körül tapasztalható rendellenes viselkedése okozhat. Ezekre a kérdésekre még vissza fogunk térni.

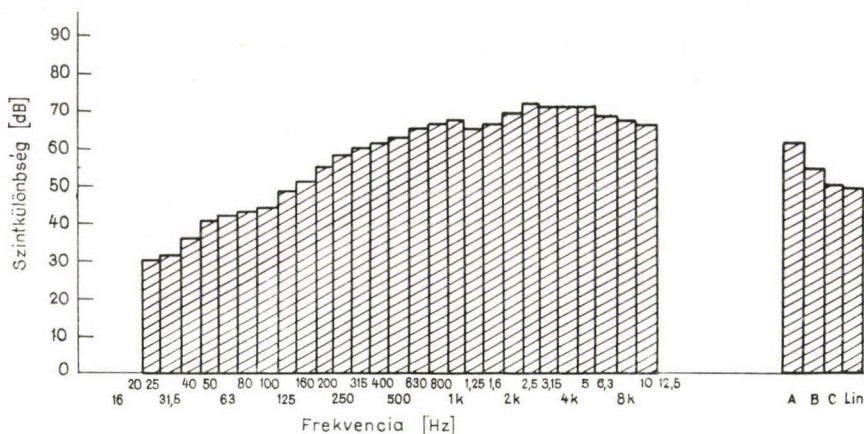
A 4. ábrán látható, hogy az utózengési idők a mély hangok tartományában igen hosszúak. Minthogy a hangteljesítmény mérésehez előnyösebb, ha az utózengési idő

I. TÁBLÁZAT

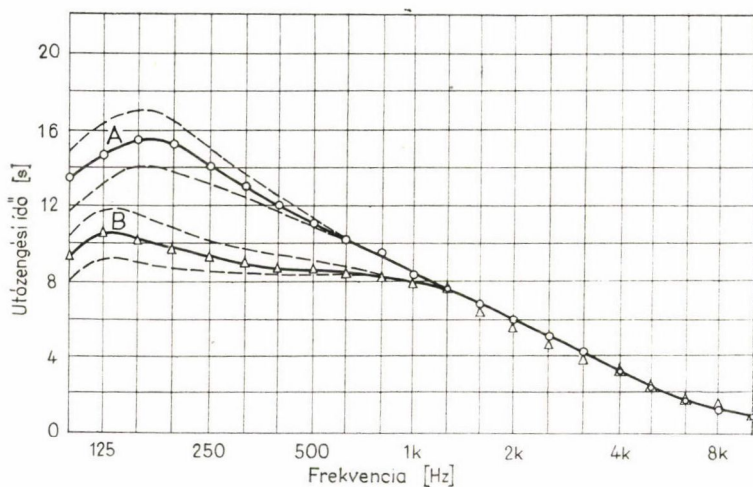
A zengőszoba tercsávkokban mért alapzaja

Frekvencia Hz	1,6	2,0	2,5	3,15	4,0	5,0	6,3	8,0	10,0	12,5	16,0	20,0	25,0	31,6	40,0
Hangnyomásszint dB	36,7	36,3	33,5	30,5	29,7	23,7	20,6	16,9	16,5	14,7	14,1	19,1	13,7	20,0	26,5

Frekvencia Hz	50	63	80	100	125	160	200	250
Hangnyomásszint dB	18,4	15,4	13,9	13,2	14,9	14,7	16,7	10,2	végig 10 dB alatt



3. ábra. A zengőszoba előterében, illetve a zengőszobában mért intenzitásszintek különbsége



4. ábra. Az üres zengőszoba (A-görbe) és a kiegyenlítő mélynyelő rezonátor behelyezése utáni állapotú zengőszoba (B-görbe) utözengési ideje. A szaggatott vonalak a mérési eredmények $\pm 0,2$ s-nál nagyobb szórását jelzik. (Hőmérséklet 17°C , relatív páratartalom 64%.)

nem változik túl gyorsan a frekvenciával, az utözengést egy általunk készített rezonátor behelyezésével csökkentettük. A 100×165 cm felületű, 1,5 mm vastag vaslemezről és megfelelő elnyelő anyagból készült lemezrezonátor hajlítási rezgések útján vesz át és emészt föl hangenergiát. Méreteit úgy választottuk meg, hogy a legnagyobb utözengésű frekvenciahely környezetében egyenletesen nagy csillapítást biztosítson. A rezonátor vázlatos rajzát az 5. ábrán közöljük, a zengőtérbe való behelyezése után mért utözengési görbét a 4. ábrán szintén föltüntettük.

Az üres szobában mért utózengési dókból az (1) Sabine, illetve a (2) Norris—Eyring-formula segítségével meghatározhatjuk a zengőszoba falának átlagos elnyelési fokát, vagy az $A = S\bar{\alpha}$ összefüggéssel értelmezett egyenértékű elnyelési felületet. Azonban, különösen nagyobb frekvenciákon a levegő elnyelését is figyelembe kell vennünk. A Sabine-féle (1) kifejezés a Kundsén által módosított formában [1] tartalmazza a levegő elnyelését is.

$$T = \frac{55,3V}{c(S\bar{\alpha} + 4\beta V)} \text{ [s]}, \quad (7)$$

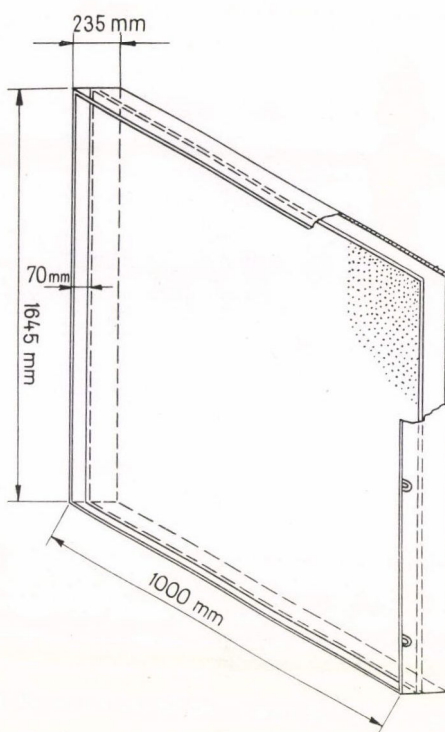
ahol a β a levegő csillapítási állandója m^{-1} -ben mérve.

A levegő csillapítási állandóját elméletileg és kísérletileg is sokan vizsgálták. Ismeretes, hogy a frekvencia négyzetével arányos, és kisebb mértékben ugyan, de függ a hőmérséklettől és a páratartalomtól is. Az irodalmi adatokból [1] kiszámoltuk a zengőszoba légterével egyenértékű elnyelési felületet, és a (6) képletből nyert $S\bar{\alpha}$ -val együtt ábrázoltuk a 6. ábrán. Látható, hogy 4,5 kHz fölött a számított levegőelnyelés már meghaladja a falak elnyelését. A 7. ábrán mutatjuk be a zengőszoba falainak ezen a módon kiszámított közepes elnyelési fokát. Az ide vonatkozó szabványok [17, 18] szerint, a falak elnyelési foka nem haladhatja meg a 0,06 értéket. Ezt a követelményt a zengőszoba még 16 kHz-en is teljesíti.

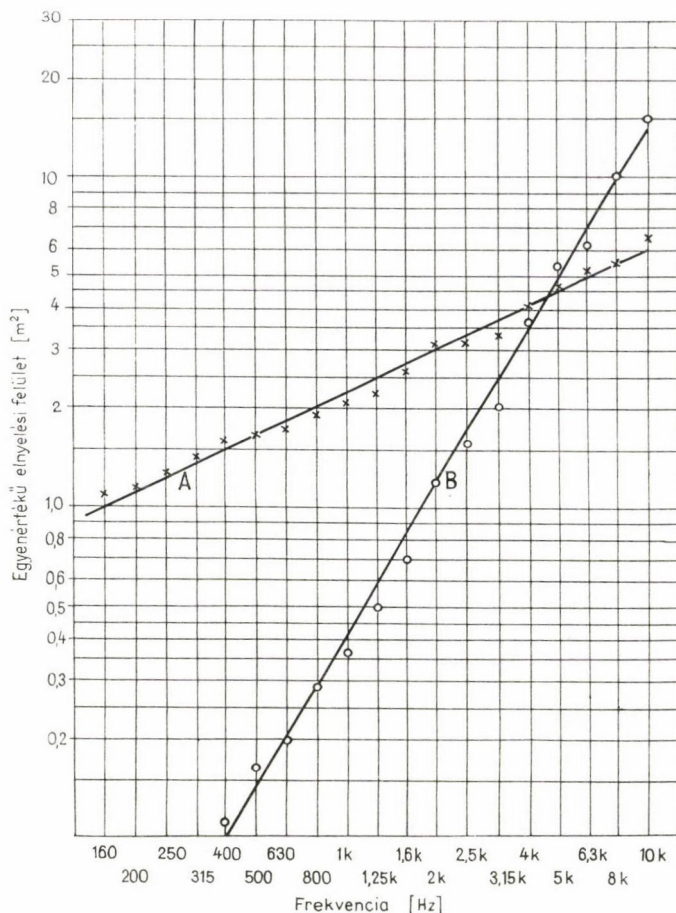
A kísérletek tanúsága szerint a falak elnyelési foka még a közepes és kis frekvenciákon is erős hőmérsékleti függést mutat, és a kapott eredmények csak nehezen reprodukálhatók. E jelenség kísérleti vizsgálata még folyamatban van. Elméleti megfontolásaink szerint a falak elnyelése többféle fizikai folyamat eredménye. Elnyelődik energia már a határfelületen adszorbeált levegőrétegben, részben viszkózus súrlódás, részben hővezetés révén. Mindkét hatás a frekvencia négyzetgyökével arányosan növekvő elnyelést okoz [10]. Jelentősen megnövekedhet, és a frekvenciával arányos jelleget ölthet ez az elnyelés, ha a felület mentén ugrásszerűen változik a hőmérséklet. Közelítő számításaink szerint $\Delta\theta$ hőmérsékletugrás a felület mentén

$$0,01 \frac{\Delta\theta}{\theta} f$$

járulékot ad az elnyelési fokhoz, ahol θ a levegő hőmérséklete $^{\circ}\text{K}$ -ban, f pedig a frekvencia Hz-ben. Ha a zengőszoba ajtaját kinyitva, a külső, általában melegebb levegőt



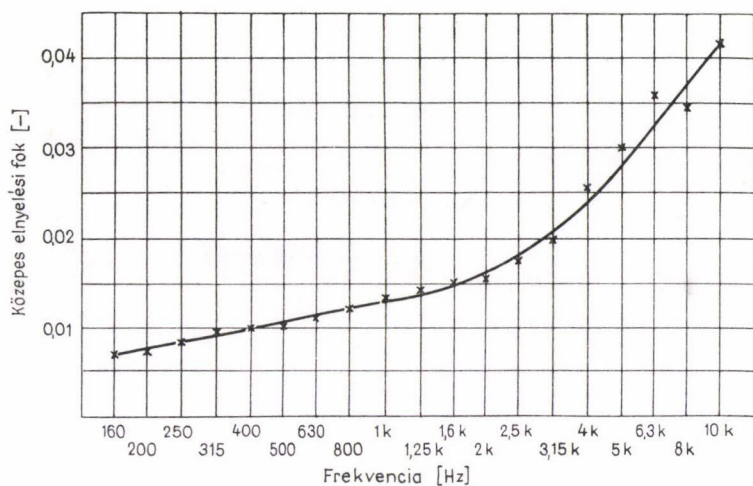
5. ábra. A zengőszobába helyezett rezonátor vázlatos rajza hátulról. A vaskeretre elől 1,5 mm vastag vaslemez van erősítve, mögötte 5 cm vastag elnyelő tábla van megfelelően be szabályozott távolságban



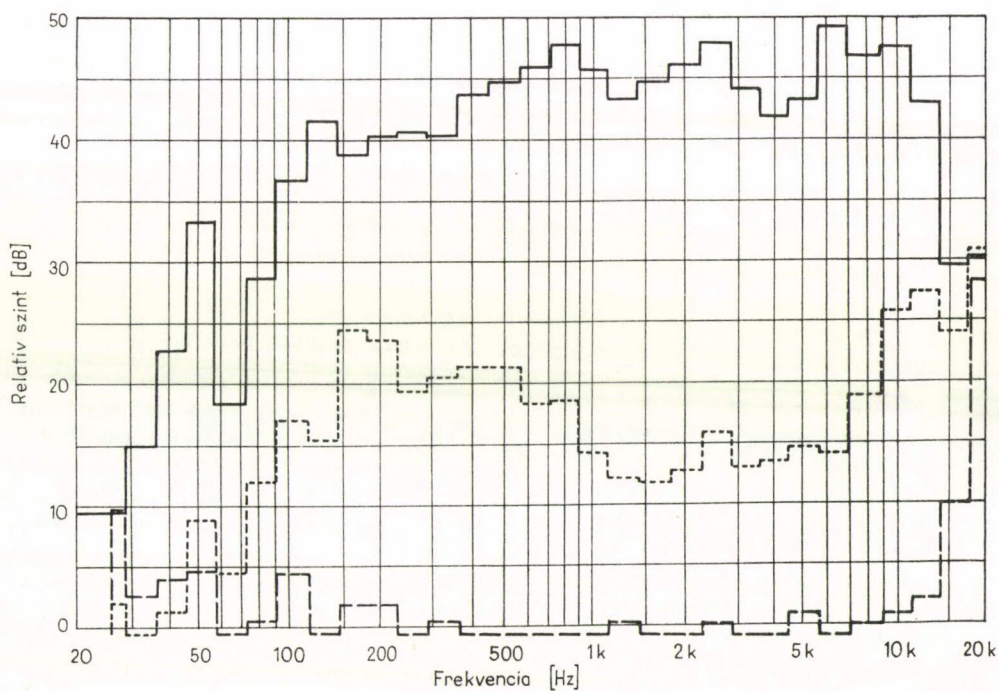
6. ábra. A fal és a levegő számított egyenértékű elnyelési felülete
($S\bar{\alpha} = A$ -egyenes $4\beta V = B$ -egyenes)

beengedjük, a szoba légterének hőmérséklete kis mértékben a falak hőmérséklete fölé nő. A kialakuló, általában csak néhány tized fokos különbség igen jelentős, esetenként 25–30%-os változást is okozhat az utószegésben és az elnyelési fokban. Ezért a méréseket mindig csak azután szabad elkezdni, amikor az egyensúlyi állapot már beállt.

Járulékos hangelnyelésre vezet az is, ha a falak hajlító, vagy vastagsági rezgésbe jönnek. Jelentős energiamennyiséget képes felvenni hajlító rezgések útján az ajtó is. Figyelembe véve a falak átlagosan 20 cm-es vastagságát és lineáris méreteit, a hajlító rezgésekfrekvencia tartománya 20 Hz-től néhány száz Hz-ig terjed, a vastagsági rezgések pedig 84 Hz-től jelennek meg. Ellenőrzésképpen gyorsulásérzékelőt helyeztünk az egyik oldalfal és az ajtó belső felületének közepére, és az azonosidejű



7. ábra. A zengőszoba falának közepes elnyelési foka a frekvencia függvényében



8. ábra. A zengőszoba falának és ajtajának rezgési szinképe tercésávokban

— az ajtó rezgése } (0-szint: $5 \cdot 10^{-4} \text{ ms}^{-2}$)
 a fal rezgése }
 ----- elektromos zörej (0-szint: $1 \mu\text{V}$)

elemzővel megvizsgáltuk azokat a rezgéseket, amelyeket a „rózsaszínű” zajjal való gerjesztés okozott. A 8. ábrán látható, hogy az ajtó az egész zengőszobai frekvenciasávban közel egyenletesen rezeg, a fal rezgése viszont — várakozásunknak megfelelően — 160 Hz-től fokozatosan csökken, majd 6–8 kHz körül kezd újra emelkedni.

4. A mérőjel vizsgálata

Az általában használt és szabványosított zengőszobai hangteljesítmény-, illetve hangnyelési fok mérések elméletének alapvető feltételezése az előbbiek szerint a hangtér diffúz volta. Az ideálisan diffúz hangtér megközelítése a gyakorlatban nehéz. Megvizsgálható azonban annak a lehetősége, hogy zengőszobában közelítőleg diffúz tér alakuljon ki. Ehhez egyrészt a mérőjelet, másrészt a mérőhelyiség további akusztikai tulajdonságait kell ismernünk.

Az ISO szabvány előírásai szerint, a mérésekhez harmad- (terc-) vagy féloktáv-sávokban szűrt fehérzajt vagy pedig ingadozó frekvenciájú hangjelet kell használni, a mikrofon jelét ajánlatos, de nem kötelező a megfelelő sávban szűrni [13]. A hazai szabválynak megfelelően hangforrásként tercsávú vagy oktáv-sávú szűrővel ellátott fehérzaj-generátort kell használni. A fehérzaj egyenletes színekpi sűrűségű mérőjel, amelynek pillanatnyi amplitúdója az időben statisztikusan ingadozik. A pillanatnyi értékek normális (Gauss) eloszlásúak.

Elméletileg is belátható, hogy ha hangforrásként keskeny sávban szűrt fehérzajt használunk, a jel amplitúdója közel periodusosan fog ingadozni. A szűrő berezgési ideje ugyanis fordítottan arányos a sáv szélességével. Ha a szűrőt egy impulzus megelőzi, berezgése és lecsengése a sáv szélességnek megfelelő frekvencián alakul ki, és így az átengedett jel a sáv szélességnek megfelelő frekvenciájú „periodicitást” mutat [20].

Ez az ingadozás bizonytalanná teszi az utózungés mérést, különösen akkor, ha csatlóódik a zengőszoba valamelyik sajáthangjához. A 125 Hz középfrekvenciájú tercsávban ez a frekvencia $\sim 28,9$ Hz, a 160 Hz-esben 36,9 Hz. A zengőszoba közelítő módszerrel számított első sajáthangjai pedig 28,8 Hz, 34,8 Hz és 36,8 Hz frekvenciájúak (lásd később). Méréseink is azt mutatták, hogy ezekben a sávokban gerjesztve a zengőszobát, a hangnyomásszint nagymértékű, közel periodusos ingadozást mutat. A szokásos akusztikai mérésekben a szűrt fehérzaj ingadozása általában azért nem okoz zavart, mert a mérőerősítők ezt az ingadozást átlagolják. Az utózungési idő fölvételekor azonban a szintíró átlagolási ideje olyan kicsi, hogy az említett ingadozásokat még követni tudja.

A tapasztalat szerint kb. 100 Hz sáv szélességű zöreijhang egyenletessége mondható mérési szempontból megfelelőnek, vagyis a mérőjel az 500 Hz középfrekvenciájú tercsávtól kezdve kielégítő: az 500 Hz-hez tartozó sáv szélesség $\Delta f = 115$ Hz.

Az előbbiekből következőleg a jelenleg elterjedt fehérzaj-generátorok nem szolgáltatnak ideális mérőjelet. A mérőjelnek olyan egyenletes színekpi sűrűségű jelnek kellene lennie, amelynek pillanatnyi amplitúdója az időben nem, vagy sokkal kisebb mértékben ingadozik. A diódák sörétzaja erre nem megfelelő. A beszédkörös mérésekkel kapcsolatban [21] már korábban rámutattunk arra, hogy több személy által egyszerre hangoztatott „f” mássalhangzó szalagra vett jele jobb fehérzaj-generátort szolgáltathatna, mint a szokásos sörétzaj-generátorok.

5. A hangtér diffuzitása

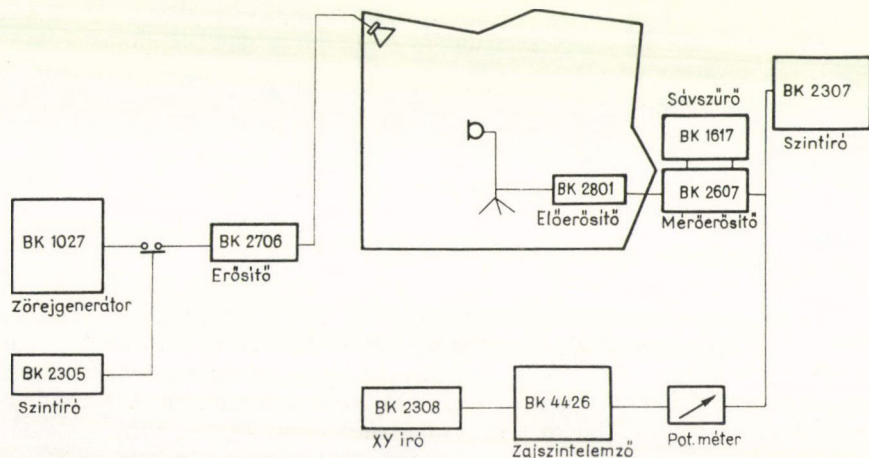
Az akusztika négyféle diffuzitás fogalmat használ. Beszélhetünk időbeli, térbeli és iránydiffuzitásról, valamint a falakról történő diffúz visszaverődésről. Ezek a fogalmak különböző súllyal szerepelnek a zengőszobai elnyelés mérés, illetve a teljesítménymérés elméletében.

Az időbeli diffuzitás, mint említettük, elsősorban a hangjel időbeli ingadozásától függ. Az utóhang mérésekor fontos, hogy a zengőszobában a hangnyomás időben ne ingadozzék. A hangteljesítmény mérésekor az időbeli diffuzitás nem lényeges, mivel az állandósult hangnyomásszintet elegendően nagy integrálási idővel mérve, az ingadozás átlagolódik.

A térbeli diffuzitás viszont fontos szerepet kap a teljesítmény mérésekor, hiszen a teremben jelenlevő energiát csak ilyen esetben lehet egyetlen mérési adatból kiszámolni. Az utóhangsúlyos mérésekor — ezzel szemben — szintcsökkenést mérünk, tehát a térbeli diffuzitás nem túl jelentős.

Az iránydiffuzitási problémáját mindkét mérési módszer során úgy kerüljük meg, hogy a mérésekhez nyomásmikrofont használunk. Viszont a diffúz visszaverődés mindkét mérés alkalmával nagyon jelentős szerepet kap, ugyanis az alkalmazott formulákban erősen kihasználjuk a visszaverődés diffúz voltát. Más visszaverődési mechanizmus föltételezése más formulákhoz vezetne. A változás azonban csak a számított elnyelési fok, illetve hangteljesítmény nagyságát változtatja meg, két anyag elnyelési fokának, illetve két hangforrás teljesítményének arányát azonban nem. Ha a két mérési módszert relatív mérésekre alkalmazzuk, a diffúz visszaverődés kérdésének vizsgálatától eltekinthetünk.

A zengőszoba időbeli és térbeli diffuzitását több előzetes méréssel ellenőriztük. Az időbeli diffuzitást adott gerjesztés esetén a hangtér egy pontjában elhelyezett mikrofon jelének ingadozása adja. Jellemző adat a hangnyomásszint ingadozásának négyzetes eltérése. A mérés során a hangteret széles sávú fehérzajjal gerjesztettük, a mikrofon jelét pedig terc-, illetve néhány esetben oktávsváiban szűrtük. A mérési összeállítást a 9. ábrán mutatjuk be. A Brüel és Kjaer gyártmányú, 4426-os típusszámú



zajszintelemző alkalmas a mért időfüggő hangjel szinteloszlásának mérésére. Az előre beállított mérési idő elteltével a készülékből kiolvashatjuk az eloszlás $\varphi(L)$ sűrűségfüggvényét, illetve a $\Phi(L)$ integrális eloszlásfüggvényt. Az eloszlásfüggvény néhány rögzített értékehez (0,1; 0,5; 0,9) tartozó szintek (L_{10} ; L_{50} ; L_{90}) közvetlenül is leolvashatók. Az L_{50} szintérték a közepes szint; L_{10} — L_{90} pedig a jel dinamikája. A 10. ábrán fölrajzoltuk a normális eloszlás- és sűrűségfüggvényt, és föltüntettük az előbb

említett nevezetes pontokat. A műszerről leolvasható még az időfüggő jel szintértékben kifejezett négyzetes középértéke egyenértékű szintje, L_{eq} is. Ha az eloszlás sűrűségfüggvénye a középértékre nézve szimmetrikus, akkor az egyenértékű szint megegyezik a középértékkel. Ilyen esetben a négyzetes eltérés (szórás) is könnyen meghatározható. Az értelmezés szerint ugyanis

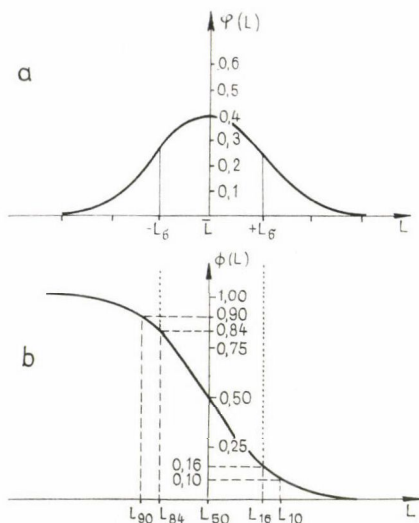
$$\int_{-L_{\sigma}}^{+L_{\sigma}} \varphi(L) dL = 0,68, \quad (8)$$

vagyis a sűrűségfüggvény alatti terület 68%-a esik a $(-L_{\sigma} \dots +L_{\sigma})$ intervallumba. Az integrális eloszlásfüggvényt figyelembe véve

$$+L_{\sigma} = L_{16} - L_{50} \quad (9)$$

$$-L_{\sigma} = L_{84} - L_{50}.$$

és



10. ábra. a) A Normális eloszlás sűrűségfüggvénye és b) eloszlásfüggvénye. A jelölések magyarázata a szövegben

függvényértékekhez tartozó szintet a műszer kiszámítja és megjeleníti. Így L_{16} és L_{84} leolvasásával közvetlenül a szórás szintben megadott értékeihez jutunk.

A mérés folyamán először ellenőriztük az eloszlásfüggvény szimmetrikus voltát. A leolvasott L_{50} és L_{eq} értékek csak igen kis mértékben (néhány tized decibellel) tértek el egymástól. Ezekután a négyzetes eltéréseket a (9) képlet segítségével számoltuk ki. A kapott eredményeket a II. táblázat megfelelő oszlopaiban tüntettük föl. Az adatok azt bizonyítják, hogy a hangtér időbeli diffuzitása egyrészt a frekvencia növekedésével, másrészt pedig a sáv szélesség növelésével nő.

A diffuzitás összetett (idő- és térbeli) jellemzésére kétféle méréssorozatot végeztünk.

a) Szemléletes mérési eredményre jutunk, ha a hangteret forgó mikrofonnal tapogatjuk le, és a mikrofon által érzékelt hangnyomásszintet szintíróval polárpapíron rögzítjük. A mikrofon által leírt kör sugarát, valamint a mérőhelyiség padlózatától mért magasságát változtatjuk. A mérési összeállítást szintén a 9. ábrán láthatjuk. Néhány példa terc-, illetve oktáv sávban szűrt rózsaszínű zajjal végzett mérésre a 11/a—c ábrán látható. Az áttekinthetőség érdekében az egyes görbék fölvételekor az erősítést változtattuk. A 11/a ábrán látható kisfrekvenciás tartományokban fölvett görbék

II. TÁBLÁZAT

A hangnyomásszint négyzetes eltérése dB-ben, különféle módszerekkel mérve.
A bekeretezett eredmények meghaladják a magyar szabvány követelményeit

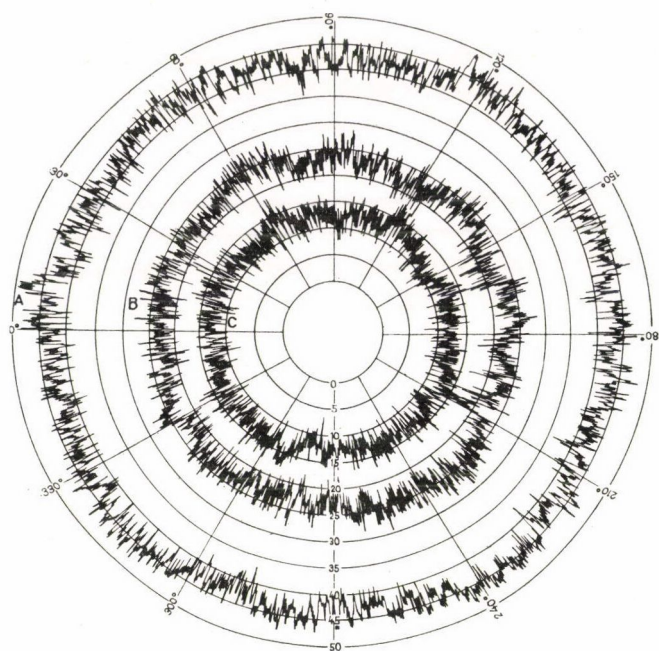
Középfrekvencia Hz	Mérési módszer	Időbeli ingadozás		Összetett ingadozás tercésávban			
		tercésávban 3.	oktáv- sávban 3.	1.	2.	3.	követel- mény
100				+2,8 -2,5	+2,7 -3,3	+2,5 -2,8	±3
125		+1,8 -2,0	+1,3 -1,2	+2 -2,5	+2,2 -2,5		±2
160		+1,8 -1,5		±2	+2,5 -2,3	±2	±2
200		+1,5 -1,3		+1,5 -0,7	+1,8 -1,7	+1,8 -1,5	±2
250		+1,2 -1,0	+0,8 -0,5	+1,5 -1,3	+1,5 -1,8	+1,3 -1,5	±2
315				+1 -1,2	+1,2 -1,5	+1 -1,2	±2
630		+0,5 -0,7		+0,8 -0,7	+1 -0,8	+0,8 -0,7	±1
8000		+0,3 -0,2		+0,8 -0,2	+0,8 -0,5	+0,8 -0,5	±1

mikrofonjelét tercenként szűrtük. A 250 Hz sávközép-frekvenciájú görbe összehasonlítható a 11/b ábrán látható ugyanilyen sávközép-frekvenciájú, de oktáv-sávban szűrt jel ingadozásával: az előbbi ingadozása feltűnően nagyobb. A 11/c ábrán bemutatott, a nagyobb frekvenciák tartományában felvett C és D görbék ingadozása már a tercésűrés ellenére is rendkívül kicsi.

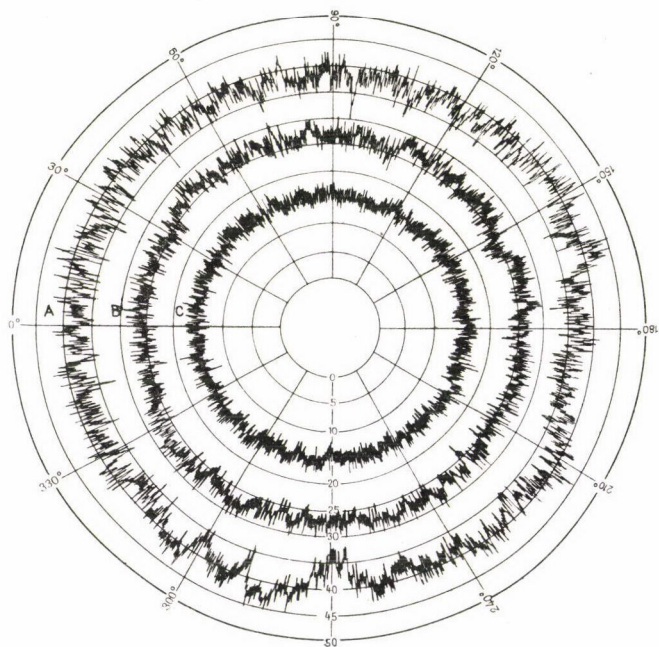
b) A forgó mikrofon jelének ingadozását statisztikusan is feldolgoztuk a zajszintelemző segítségével. Az átlagolás 25 teljes körülfordulást vett figyelembe. A méréseket háromféle jellel végeztük, és az eredményeket a II. táblázatban foglaltuk össze.

1. A hangteret tercésávú fehérzajjal gerjesztettük a mikrofonjelet nem szűrtük.
2. A hangforrás változatlan volt, de a mikrofonjelet is szűrtük.
3. A bemenőjel teljes sávú fehérzaj volt, csak a mikrofonjelet szűrtük.

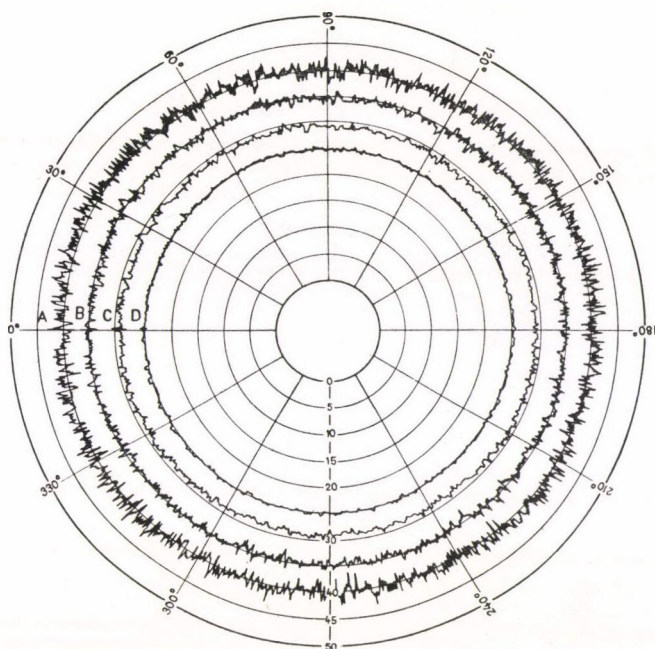
Az eredményekből az látható, hogy a mikrofon térbeli mozgatásával a hangnyomásszint szórása növekedett. A szabvány által követelt diffúz hangteret a legjobb



11. ábra. a) A tercászv-középfrekvenciák A) 200 Hz B) 250 Hz C) 315 Hz



11. ábra. b) Az oktászv-középfrekvenciák A) 125 Hz B) 250 Hz C) 500 Hz



11. ábra. A hangnyomásszint ingadozása zengőszobában.
A mikrofon forgási sugara 1,5 m, távolsága a padlózattól 1,5 m.

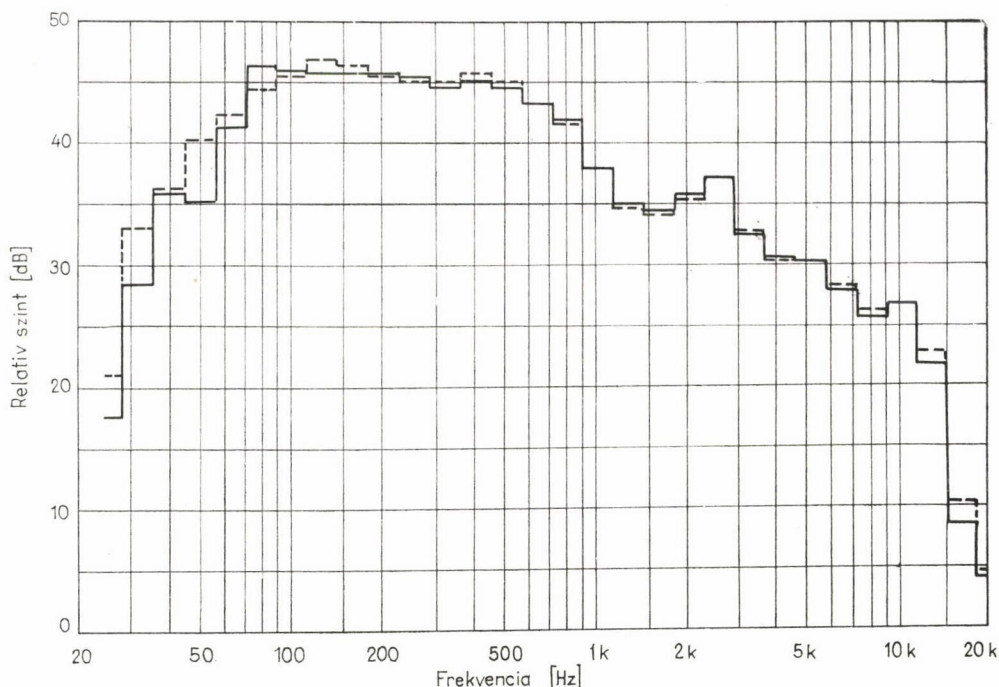
c) A tercsáv-középfrekvenciák

A) 800 Hz B) 2500 Hz C) 4000 Hz D) 10 000 Hz.

A szintértékek önkényesen úgy vannak beállítva,
hogy a görbék elférjenek egymás mellett.

közelítésben akkor kapjuk, ha méréskor a teret széles sávban gerjesztjük és a mikrofonjelet szűrjük [22]. A mérések során ügyelnünk kell arra, hogy kisebb frekvenciákon a nyomásingadozás nagyobb, így ezeken a helyeken több mérést kell végeznünk, mint nagyobb frekvenciákon. Ezzel a mérés hibája csökkenthető. Végül csupán a térbeli diffúziásra jellemző adatot nyerhetünk, ha a zengőszobai állandósult hangnyomásszintet hosszú idejű átlagolással vizsgáljuk az azonosidejű elemző segítségével. Egy hangforrást rózsaszínű zajjal gerjesztettünk, és először a szoba közepén álló, majd 1,5 m-es sugarú körön forgó mikrofonnal fölveltük a színeképet 128 s átlagolási idő mellett. Az eredményt a 12. ábrán mutatjuk be. Az eltérés 10 kHz-ig terjedő sávban sehol sem éri el a 2 dB-t.

A hangtér diffúziását diffuzorok behelyezésével növelhetjük. Tapasztalataink azonban azt mutatják, hogy bár nagyobb frekvenciákon a diffúziás valóban jobb lesz, a diffuzorok károsan növelik a felületi elnyelést, és ami még hátrányosabb, csökkentik az effektív térfogatot. A mérőmikrofon elhelyezésekor ugyanis mostmár arra is ügyelnünk kell, hogy ne csak a falfelületekről, hanem a diffuzoroktól is megfelelő távolságra legyen. A hangtér diffúziásának javítására egyébként is inkább a kisebb frekvenciák tartományában van szükség.



12. ábra. Térbeli diffúzitás a zengőszobában

—— az állandósult hangnyomás tercsávszintjei álló mikrofonnal mérve,
 ----- ugyanaz forgó mikrofonnal mérve. Az alapszint az ábrán 50 dB

6. Az utózengési idő mérési módszere: javaslat a szabványok módosítására

Mind a hangteljesítmény, mind pedig a hanglenyelési fok meghatározásához ismernünk kell a terem utózengési idejének frekvenciafüggését.

Vizsgáljuk meg először a 100 Hz—500 Hz frekvenciatartományban különböző módszerekkel mért utózengési görbéket! A legnehezebben értékelhető görbéket akkor kapjuk, ha a hangteret ingadozó frekvenciájú hanggal gerjesztjük. A mért utózengési időértékek szórása is ebben az esetben a legnagyobb. Az ingadozó frekvenciájú hanggal való gerjesztés esetén előfordulhat, hogy a zárt teret valamelyik sajátfrekvenciáján periódusosan meglökjük, és így a teremben mérhető hangnyomásszint nagymértékben (ez esetben periódusosan) ingadozik. Ez az ingadozás a hangenergia elhalásakor is észlelhető. A hangnyomásszint ingadozása tercenként szűrt fehérzaj bemenőjele esetén, a jel rendszertelenebb ingadozása miatt nem olyan nagymértékű, mint ingadozó frekvenciájú hang esetén, de ekkor is jelentős. A legkisebb ingadozás egyértelműen akkor mutatkozik, amikor a hangteret széles sávú fehérzajjal gerjesztjük, s csak a mikrofon jelét szűrjük. A mikrofonjel szűrése feltétlenül szükséges. Előfordulhat ugyanis, hogy a hangtér gerjesztésekor, akár ingadozó frekvenciájú hanggal, akár sávszűrt fehérzajjal gerjesztünk, más frekvenciákra is áttevődik hangenergia. Ezeken a rezonancia-frekvenciákon az utózengési idő más, vagyis amennyi-

ben a mikrofon jelét nem szűrjük, hamis eredményt kapunk. Helyes lenne tehát, ha a már említett szabványok kötelezően előírnák a mikrofonjel szűrését.

A különböző mérési módszerekkel kapott utózengési időértéket statisztikusan is feldolgoztuk. Az eredmények azt mutatják, hogy a különböző módszerekkel mért utózengési időértékek átlagai is különbözők, és a „bemenőjel fehérzaj, kimenőjel szűrve” mérési módszerrel kapott utózengési időátlagok egyértelműen kisebbek a kis frekvenciatartományban, mint a többi módszerrel kapott átlagok (500 Hz-en felül az eltérés és a szórás kicsi, vagyis elhanyagolható).

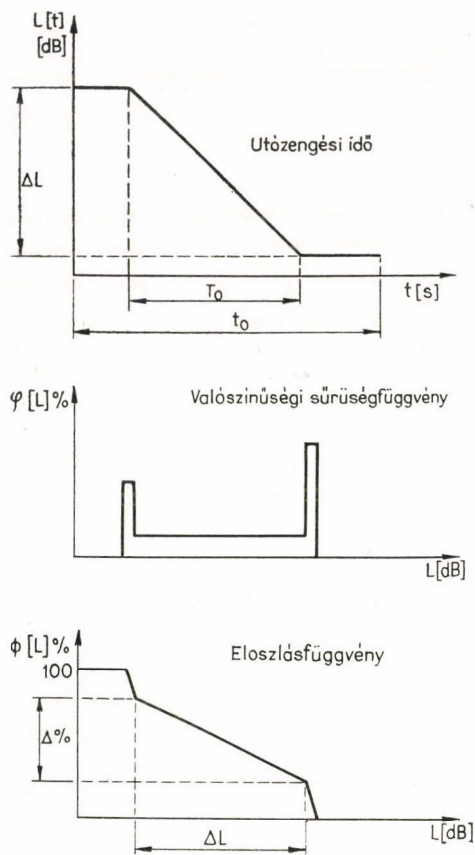
P. V. Brüel összehasonlította egy hangforrás süket-, illetve zengőszobában mért hangteljesítmény-értékeit [23], és arra a következtetésre jutott, hogy a kétfajta mérési módszerrel kapott teljesítményértékek közti különbség kis frekvenciákon nagymértékben csökken, ha az utózengési görbét más módon értékeli ki, mint ahogy azt a szabványok jelenleg előírják. Az előírások szerint, az utózengési görbét a -5 dB és a -35 dB szintértékek közötti szakaszon kell közepelve értékelni (0 dB a közepes intenzitásszint a generátor bekapcsolt állapotában). Brüel szerint az utózengési görbét közvetlenül a generátor kikapcsolása utáni meredekebb esésű szakasz alapján kell meghatározni. Ekkor ugyanis a kapott utózengési idő értéke kisebb, és ezzel az utózengési idővel számolva sokkal kisebb lesz az eltérés a zengőszobában és a süket-szobában kapott teljesítményértékek között. Bár az említett értékelési módszerrel nem lehet egyetérteni, látszik, hogy mások is fölfigyeltek a különféle mérési eljárások közti ellentétre. Véleményünk szerint az eltérések csökkentésében a széles sávú hangtergerjesztésnek jelentős szerepe van.

Az előzőkből egyértelműen kiderül, hogy a különféle módszerekkel mért utózengési időértékek jellegzetesen függenek attól, hogy a mérést hogyan végezzük. Amíg a különböző laboratóriumokban más és más mérési módszereket alkalmaznak, nem várhatjuk, hogy az eredmények összehasonlíthatók legyenek. Az utózengési idő mérést egyre több helyen automatizálják. Jelentős mértékben csökken a mérés időtartama, ha az utózengési időt — tercsávós azonosidejű elemző és számítógép segítségével — az összes tercsávban egyidejűleg mérik. Ez pedig csak széles sávú gerjesztéssel, vagyis az általunk leghelyesebbnek ítélt gerjesztési módszerrel oldható meg. Célszerű volna, ha a megfelelő szabványok is a széles sávú gerjesztést tennék kötelezővé.

Az említett automatikus mérési eljárás nemcsak a gyorsasága miatt jobb, mint a hagyományos, hanem azért is, mert tetszőlegesen sok mérést végezhetünk el egymás után, és a számítógéppel folyamatosan kiszámíthatjuk az utózengési idők átlagértékét és szórását. Ily módon az időbeli és térbeli ingadozások hatása csökkenthető.

Ha egy laboratórium nem rendelkezik számítógéppel, a térbeli diffúzitás mérésekhez felhasznált zajszintelemző is alkalmassá tehető az utózengési idő mérésére. Ha a zengőszobába jutó fehérzajt szabályos időközökben ki-be kapcsolgatjuk, és a 13. ábrának megfelelő lefutású, egy adott tercsávban szűrt mikrofonjelet a zajszintelemzőre visszük, az amplitúdók időbeli eloszlását leíró sűrűségfüggvény és eloszlásfüggvény is a 13. ábrán bemutatott jellegű lesz. Bebizonyítható, hogy az eloszlásfüggvény középső, egyenes szakaszának meredeksége, és az utózengési idő között egyértelmű kapcsolat van:

$$T_0 = \frac{\Delta\%}{\Delta L(\text{dB})} \frac{100}{60 \cdot t_0}, \quad (10)$$



13. ábra. Az utózenngés időfüggvénye, sűrűségfüggvénye és eloszlásfüggvénye. Megfigyelhető, hogy az utózenngés 60 dB-es csökkenése (ΔL) meg egyezik az eloszlásfüggvény töréspontjainak szintben mért távolságával

ahol T_0 az utózenngési idő, t_0 egy mérési ciklus ideje, Δ % és ΔL jelentése pedig a 13. ábráról olvasható le.

A (10) képlet változatlanul érvényben marad, ha a mérést tetszőleges, de mindig egész számú ciklusra terjesztjük ki. Az eddigi elvégzett mérések során a ciklusok száma általában 10 és 20 között volt, amely már elegendőnek bizonyult az időbeli és térbeli ingadozások kiközepelésére. Az eljárást a mikrofon forgatásával is kombinálhatjuk. Az eddig szerzett mérési tapasztalataink azt bizonyítják, hogy ez a módszer jóval pontosabb, mint a régi, és egyszerűbbé teszi a mérést és az értékelést. A 6. ábrán közölt utózenngés értékeket már az új módszerrel mértük.

7. A teljesítménymérés elméleti feltételezései és ezek megvalósulása a gyakorlatban

Korábbi méréseink alapján [24] is megállapítottuk, hogy igaz a teljesítménymérés azon feltételezése, hogy a hangforrás által kisugárzott teljesítmény egyensúlyba kerül a falak és a levegő elnyelésével. A 6. ábráról leolvasható, hogy a zengőszobában a falak és a levegő elnyelése milyen kapcsolatban áll egymással a frekvencia függvényében. Arra vonatkozóan, hogy a hangtér egyetlen pontjában mért intenzitásadatokból mennyire megbízhatóan számítható

a hangforrás teljesítménye, a diffúzitás adatai adnak tájékoztatást. Minél nagyobb a hangnyomásszint térbeli ingadozása, annál nagyobb a mérés hibája. A diffúzitásmérés adatait a hibaszámításnál figyelembe kell venni: +3 dB eltérés 100%-os, -3 dB eltérés 50%-os hibát jelent.

Elméletileg lényegesen nagyobb gondot okoz a teremvisszahatás. Kísérleteink során hangsugárzók teljesítményét számítottuk ki süket- és zengőszobai mérések alapján. Az eredmények nem egyeztek meg. Azt is észleltük, hogy a zengőszobába helyezett hangsugárzó (HOX 22) nem tudta a teret minden frekvencián egyforma mértékben gerjeszteni. A jelenség feltárása érdekében valamelyik jellemző mérési elrendezésben megmértük a zengőszoba adott pontján kialakuló hangnyomásszintet a frekvencia függvényében. Az így kapott görbét a továbbiakban az egyszerűség kedvéért teremráfelelési görbének nevezzük.

Az elmélet szerint l_x, l_y, l_z oldalélű $\alpha \sim 0$ felületi elnyelésű, téglatest alakú helyiség sajátfrekvenciáit a következő összefüggés adja [1, 4, 8, 9]:

$$f_q = \frac{c}{2} \sqrt{\left(\frac{q_x}{l_x}\right)^2 + \left(\frac{q_y}{l_y}\right)^2 + \left(\frac{q_z}{l_z}\right)^2}, \quad (11)$$

ahol, q_x, q_y, q_z pozitív egész számok.

Azoknak a módusoknak a száma, amelyeknek frekvenciája egy megadott érték-nél kisebb, V térfogatú üreg esetén:

$$N \simeq \frac{4Vf^3}{c^3}. \quad (12)$$

Ebből következőleg az f és $f+df$ határok közé eső rezgésszámmal jellemzett módusok száma:

$$dN \simeq \frac{12Vf^2}{c^3}. \quad (13)$$

A frekvencia növekedésével tehát az ugyanolyan széles frekvencia-tartományba eső sajáthangok száma is növekszik. Az elmélet föltételezései a gyakorlatban csak közelítőleg vagy egyáltalán nem teljesülnek. A levezetés [9] ugyanis csak egyszerű teremalakra (téglatest) és csillapítatlan esetre vonatkozik (a falfelület és a levegő elnyelését elhanyagolja), a három dimenzióban kialakuló állóhullámokat egymástól függetlenül tárgyalja (a valóságban ezek csatolásban vannak).

A terem sajáthangjainak meghatározásához adott hangszóró-mikrofon elrendezés esetén felvettük a teremráfelelési görbét. E mérésnél ügyelni kell arra, hogy megfelelően nagy frekvencia-stabilitású szinuszos hanggenerátort használjunk. Az általunk használt B és K 1027 típusú hanggenerátor rövid idejű frekvencia-stabilitása

$$\frac{\Delta f}{f} \sim 10^{-6},$$

ami a kívánalmaknak megfelel. Ellenőrzésül a hangteret állandó frekvenciájú szinuszos hanggal gerjesztettük. A terem rögzített pontjában elhelyezett mikrofon valóban állandó hangnyomásszintet mért. Ugyanezt a mérést kisebb állandóságú generátorral elvégezve, a térbeli jel állandó ingadozását tapasztaljuk. A teremráfelelési görbe felvételekor a generátorral együtt futó szintíró 1 hertzenként ellenőrző jelet adott. (A papírsebesség 1 mm/s, az írássebesség 500 mm/s volt.) A teremráfelelési görbe néhány szakasza a 14. ábrán látható.

A görbék szembevető tulajdonsága, hogy a rezonanciahelyeken a hangnyomásszint kisebb mértékben tér el az átlagos hangnyomásszinttől pozitív irányban, mint az antirezonancia-helyeken negatív irányban (14/b ábra). Emellett a rezonanciák kiszélesedtek, míg az antirezonanciák rendkívül élesek voltak, ami az állóhullámok tárgyalásából is világosan következik. A csomópontok, vagyis az antirezonanciák helye pontosan reprodukálható, tehát ezek az adatok a terem—hangsugárzó rendszerre jellemzők, és az adatokat a fizikai paraméterek (pl. a hőmérséklet) csak kis mértékben befolyásolják.

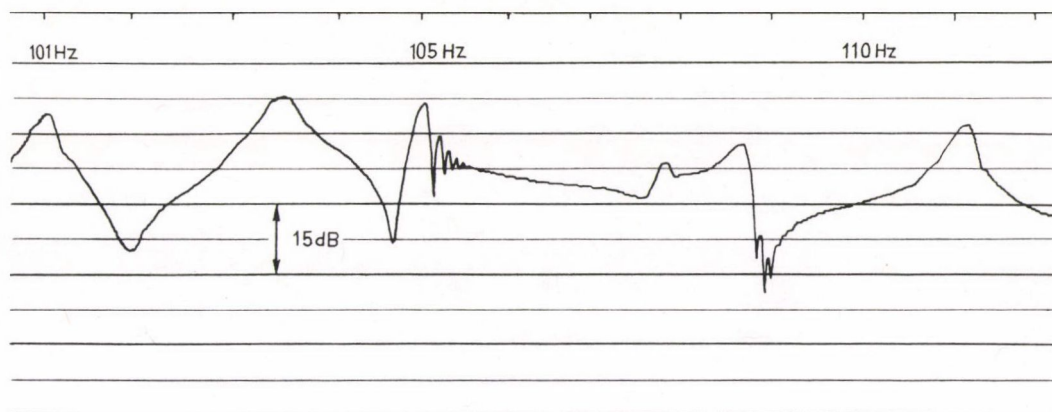
Az Akusztikai Kutatólaboratórium zengőszobájának falai egymással nem párhuzamosak (lásd az 1. ábrát). A zengőszoba átlagos méreteivel megadott téglatastre számítógéppel meghatároztuk a sajátfrekvenciák sorozatát a (11) összefüggés szerint.

Ha az így kapott adatokat (III. táblázat) összehasonlítjuk a mérési eredmények-

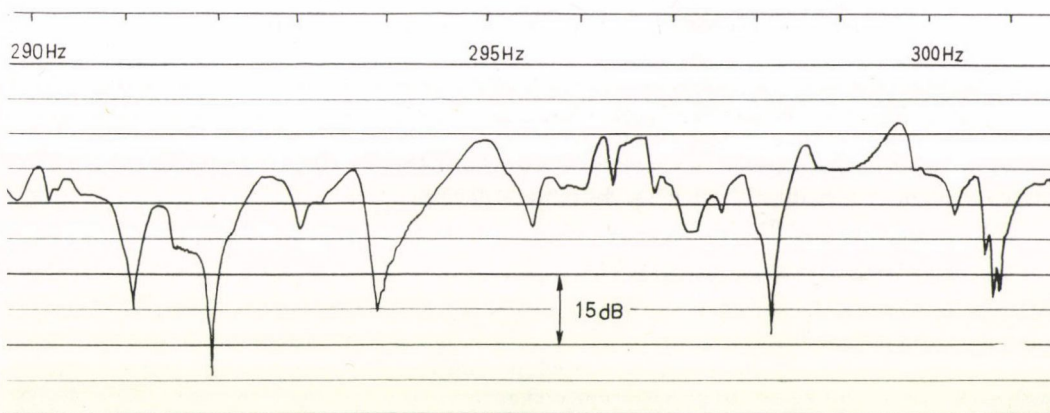
III. TÁBLÁZAT

E zengőszoba átlagos méreteivel ($8,57 \times 4,87 \times 4,60 \text{ m}^3$) megadott téglatest alakú terem
40 legkisebb sajátfrekvenciája ($c = 339,3 \text{ m/s}$)

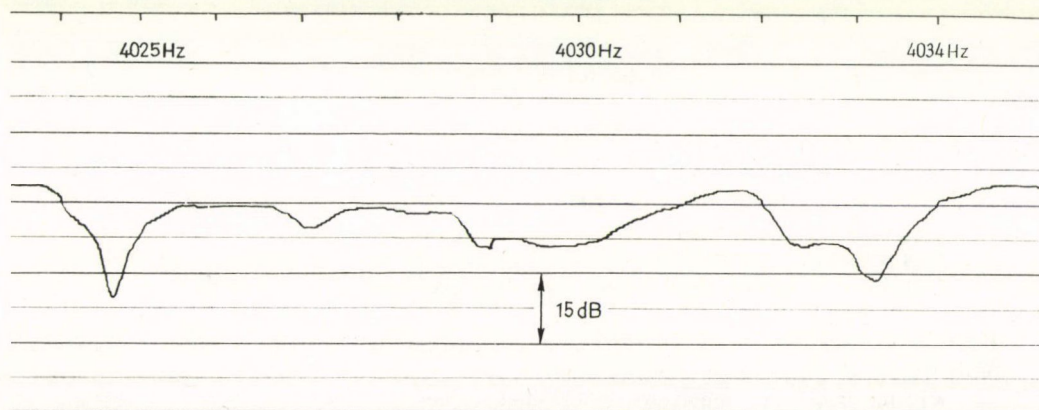
Rezonancia frekvencia f_q [Hz]	Gerjesztési paraméter			Rezonancia frekvencia f_q [Hz]	Gerjesztési paraméter		
	q_x	q_y	q_z		q_x	q_y	q_z
28,82	1	0	0	90,36	2	2	0
34,79	0	1	0	93,21	3	1	0
36,77	0	0	1	93,46	2	0	2
45,18	1	1	0	93,97	3	0	1
46,73	1	0	1	97,56	2	2	1
50,62	0	1	1	99,72	2	1	2
57,65	2	0	0	100,21	3	1	1
58,25	1	1	1	101,25	0	2	2
67,33	2	1	0	104,37	0	3	0
68,38	2	0	1	105,27	1	2	2
69,58	0	2	0	108,28	1	3	0
73,55	0	0	2	110,66	0	3	1
75,31	1	2	0	110,67	0	0	3
76,72	2	1	1	110,99	3	2	0
78,70	0	2	1	113,53	3	0	2
79,00	1	0	2	114,35	1	3	1
81,37	0	1	2	114,36	1	0	3
83,81	1	2	1	115,64	4	0	0
86,32	1	1	2	116,00	0	1	3
86,48	3	0	0	116,51	2	2	2



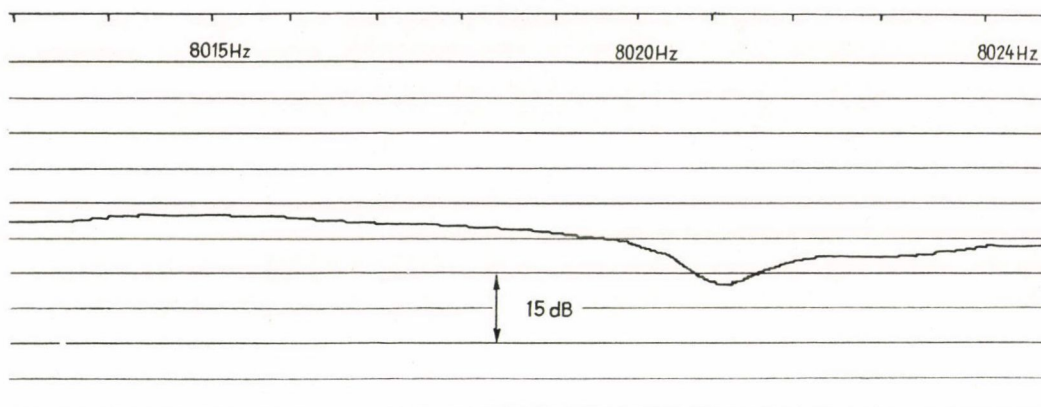
14. ábra. Néhány részlet a teremráfelelési görbéből, a) 101–111 Hz között,



14. ábra. b) 290–300 Hz között,



14. ábra. c) 4025–4035 Hz között,



14. ábra. d) 8015–8025 Hz között. A függőleges skála relatív szintérték, a teljes átfogás 75 dB

kel (14/a ábra), megfigyelhetjük, hogy kis frekvenciákon a sajáthangok előfordulási gyakorisága közelítőleg megegyezik. Közepes és nagy frekvenciákon az elmélet már nem ad hű képet a valóságról. Ennek egyik alapvető oka, hogy a tárgyalás csak veszteségmentes esetre érvényes, viszont mind a fal felületi elnyelése, mind pedig a levegő elnyelése növekszik a frekvenciával. Az eredmény a 14/c és 14/d ábrán látható. Ha a zengőszobába kis frekvencián is jól nyelő anyagot helyezünk a ráfelelési görbe mély hangokon is „kisímul”, jellege a 14/c és 14/d ábrán feltüntetett görbéhez lesz hasonló. *Kutruuff* szerint a görbe minimumait az egyidejűleg gerjesztett közeli sajáthangok interferenciája okozza [25]. Az általunk használt állandó frekvenciájú jel azonban legfőljbbe csak egy sajáthangot gerjeszt, így a *Kutruuff*-féle magyarázat a mi esetünkre nem alkalmazható. Észrevettük, hogy bizonyos esetekben a leszívások frekvenciahelyének környezetében a hangnyomásszint térbeli átlagának is minimuma van, ami éppen azt bizonyítja, hogy ezek a minimumok nem lehetnek kioltás jellegűek. Valószínű tehát, hogy a terem ezeken a frekvenciákon kevés energiát tud a hangforrásból felvenni, és ez azt bizonyítja, hogy a terem visszahatását a hangforrásra nem hanyagolhatjuk el. A visszahatás mechanizmusának tisztázására további elméleti és kísérleti vizsgálatokat kell még végezni.

8. Következtetések

Méréseink bizonyították, hogy a vizsgált zengőszoba a szabványos pontossági követelményeknek megfelel. Mind elméletileg, mind pedig mérésekkel megmutattuk, hogy az utózengetési idő mérési módszerét illetően a jelenleg érvényes szabványos előírásokon változtatni kell. Rámutattunk a hangteljesítmény mindkét fajta mérésének elvi és gyakorlati hiányosságaira.

A problémák további tisztázását kutatási tervbe vettük. Mivel fölmerülhet az a gondolat, hogy egy 200 m³ térfogatú teremben csökkennek az általunk fölvezetett nehézségek, ellenőrző méréseket kívánunk végezni a braunschweigi Physikalisch-Technisches Bundesanstalt hasonló célú, de a mienknél nagyobb méretű zengőszobáiban.

Kíváncsú volt a zengőszobák elméletét úgy módosítani, hogy számot adjon az antirezonanciákról és a teremvisszahatásról is. Másrészt kíváncsúnak látszik a külön-

böző típusú hangforrások teljesítményének mérésére biztosan azonosítható gyakorlati mérési módszereket kidolgozni. A teremvisszahatás problémájának tisztázása mindkét szempontból nagy jelentőségű. Eddigi tapasztalataink szerint a hangforrás által kisugárzott teljesítmény mért adatában még nagyságrendi különbség is lehet az akusztikai környezettől függően.

Kísérletileg is alátámasztott megfelelő elméleti modell birtokában esetleg előre ki lehetne számítani, hogy a zengőszobában meghatározott hangteljesítményt sugárzó hangforrás a beépítési terében mekkora zajszintet fog kelteni. Ezáltal a jelenlegi módszereknél jóval pontosabban lehetne tervezni különféle munkahelyeken a gépek, berendezések telepítését, illetve a termék, műhelycsarnokok kialakítását. Másik várható eredmény a hangsugárzók akusztikai hatásfokának jelentős javulása a hangsugárzóknak a helyiségekhez való tervszerű illesztése révén.

IRODALOM

1. Tarnóczy T., Fizikai akusztika. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1963.
2. Norris, R. F.—C. A. Andree., An instrumental method of reverberation measurement. J. Acoust. Soc. Am. 1, 366—372, 1930.
3. Eyring, C. F., Reverberation time in "dead" rooms. J. Acoust. Soc. Am. 1, 217—241, 1930.
4. Tarnóczy T., Akusztikai tervezés. Műszaki Kiadó, Budapest, 1966.
5. Kuttruff, H., Simulierte Nachhallkurven in Rechteckräumen mit diffusem Schallfeld. Acustica 25, 333—342, 1971.
6. Caroll, M. M.—C. F. Chien., Decay of reverberant sound in a spherical enclosure. J. Acoust. Soc. Am. 62, 1442—1446, 1977.
7. Joyce, W. B., Sabine's reverberation time and ergodic auditoriums. J. Acoust. Soc. Am. 58, 643—655, 1975.
8. Bolt, R. H., Frequency distribution of eigentones in a three-dimensional continuum. J. Acoust. Soc. Am. 10, 228—234, 1939.
9. Hunt, F. V.—L. L. Beranek—Ma Daa You., Analysis of sound decay in rectangular rooms. J. Acoust. Soc. Am. 11, 70—94, 1939.
10. Morse, M.—K. Ingard., Theoretical Acoustics. McGraw-Hill, New York, 1968.
11. Dowell, E. H. et al., Acoustoelasticity: General theory... J. Sound Vib. 52, 519—542, 1977.
12. Dowell, E. H. Reverberation time, absorption and impedance. J. Acoust. Soc. Am. 64, 181—191, 1978.
13. ISO/R 354—1963. Measurement of absorption coefficients in a reverberation room.
14. MSz 18 156—74. Hangelnyelés mérése zengő szobában.
15. Tarnóczy, T., Akustische Untersuchungen in kleinen Hallräumen. Proc. 3. Int. Cong. Acoustics Vol. II (Ed. L. Cremer), Stuttgart 1961, 868—872.
16. Tarnóczy T., Kisméretű zengőtér mesterséges utözengéskeltésére és elnyelési fok mérésére. Magyar szabadalom 146 171, 1960. június 10.
17. ISO 3741—1975. Determination of sound power level of noise sources. Precision methods for broadband sources in reverberation rooms.
18. ISO 3742—1975. Determination of sound power level of noise sources. Precision methods for discrete frequency and narrow-band sources in reverberation rooms.
19. Tarnóczy T., A Magyar Tudományos Akadémia akusztikai mérőhelyiségeinek műszaki adatai. Magy. Fiz. Folyóirat 28, 377—397, 1980.
20. Rice, S. O., Mathematical analysis of random noise I—II. Bell Syst. Techn. J. 23, 282—332, 1944.
21. Tarnóczy, T. Die akustische Struktur der stimmlosen Engelaute. Acta Linguistica (Budapest) 4, 313—349, 1954.
22. Angster, J.—Tarnóczy, T., Some problems of sound absorption measurements in reverberation rooms. Proc. 3. Symp. F. A. S. E. on Build. Acoust. Dubrovnik, 51—54, 1979.
23. Brüel, P. V., The enigma of sound power measurements at low frequencies. B-K Technical Review 3, 1—40, 1978.
24. Angster, J., Some problems of measuring the sound power of musical instruments. 18. Conf. on Acoustics, Český Krumlov, 5—8, 1979.
25. Kuttruff, H., Room Acoustics. Applied Sci. Publ. London, 1979.

A KVARK-GLUON ANYAG TERMODINAMIKÁJA*

SZLACHÁNYI KORNÉL

TARTALOM

Bevezetés	311
1. Mértékelméletek termodinamikája	314
1.1. Klasszikus mértékelméletek	314
1.2. A Hamilton-formalizmus	316
1.3. Kvantálás mértékrögzítés nélkül	317
1.4. Termodinamika	318
1.5. Az állapotösszeg előállítása funkcionálintegrállal	319
1.6. A sztatikus kvark limesz	322
2. Az aszimptotikusan szabad kvark-gluon gáz	325
2.1. Gráfszabályok	327
2.2. Renormálás	329
2.3. Renormcsoport	331
2.4. A polarizációs tenzor	336
2.5. A termodinamikai potenciál	339
3. Mértékelmélet rácson	340
3.1. Rácsgeometria és a Lagrange-formalizmus	341
3.2. A Hamilton-formalizmus	343
3.3. Klasszikus vákuum konfigurációk	347
4. A fázisátmenet	348
4.1. A kvark-gluon nyomás és a zsákállandó	349
4.2. A kvarkanyag-maganyag fázisdiagram	350
4.3. Monte Carlo-módszer a véges hőmérsékletű rács SU(2) elméletre	351
4.4. Numerikus eredmények	353
4.5. A kontinuum limesz	356
Összefoglalás	358
I. Függelék	359
II. Függelék	360
III. Függelék	362
Irodalomjegyzék	363

BEVEZETÉS

Általánosan elfogadott vélemény, hogy a kvantumkromodinamika (QCD) fogja leírni az erős kölcsönhatásokat. Attól azonban még messze van, hogy olyan sikeres legyen, mint a kvantum-elektrodinamika.

A QCD alacsony energiás viselkedését nem ismerjük, pedig ennek kellene megmagyaráznia a kvarkbezárás jelenségét. Csupán félfenomenologikus modellekkel sikerült bizonyos eredményeket elérni a hadronok sztatikus paramétereinek meghatá-

* Érkezett 1981. március 10.

rozásában, mint pl. a kvarkónium-, a húr- vagy a zsákmodellben. Azonban ezek a modellek automatikusan tudják a kvarkbezárást, és a QCD-ből szigorúan nem származtathatók.

Ezzel szemben nagy impulzusoknál az elmélet aszimptotikusan szabad, s ezért perturbatívan számolható. Az eredmények jól egyeznek a kísérleti adatokkal (pl. skálaviselkedés mélyen rugalmatlan lepton-nukleon szórásban), bár mind a kísérletek, mind a számolások elmaradnak attól a pontosságtól, amit az elektrodinamikában sikerült elérni. Ezenkívül elméleti problémái is vannak a perturbatív QCD-nek. Például, hogy a nagy euklideszi impulzusátadásra bizonyított aszimptotikus szabadság használható-e nagy valódi impulzusátadású folyamatok kiszámításánál (e^+e^- annihiláció, Drell-Yan folyamat).

Az utóbbi öt évben kezdődtek azok az elméleti kutatások, amelyek a QCD-t — vagy általában a nem ábeli mértékelméleteket — zérustól különböző hőmérsékleten és barionsűrűségnél vizsgálják. Ez a terület ma is fejlődőben van. Termodinamikai körülmények között a mértékelméletek tulajdonságait új dimenziókban (hőmérséklet, sűrűség) lehet vizsgálni. Ha a hőmérséklet vagy a sűrűség elég nagy, új fizikai jelenséget várunk: a kvarkok felszabadulását.

Ennek a fázisátalakulásnak a létezésére három dolog utal. Egyrészt a nagy hőmérsékleten és sűrűségnél talált aszimptotikus szabadság [1], szembeállítva az alacsony hőmérsékleten és sűrűségnél észlelt kvarkbezárással. Másrészt rácson erős csatolási limeszben kis, illetve nagy hőmérsékleteknél megtalálható a bezáró, illetve a szabad fázis [2, 3], bár ebből nem következik, hogy a csatolás gyengülésével (kontinuum limesz) is megmarad mind a kettő. Harmadrészt legújabban Monte Carlo-szimulációval (egyelőre SU(2) mértékelméletben) igazolódott, hogy a két fázis megmarad gyenge csatolási limeszben is és meg lehetett határozni a kontinuum elméletre vonatkozó átalakulási hőmérsékletet [4, 5].

Minden jel arra mutat tehát, hogy a QCD-nek két fázisa van: a „hideg” és „ritka” hadron fázis, és a forró és nagyon sűrű kvark fázis, amely a kvarkok és gluonok gázállapota. Arról, hogy ez a kvark-gluon gáz végtelen nagy hőmérsékleten szabad gáznak tekinthető-e, nem alakult ki egységes vélemény az irodalomban. Az aszimptotikus szabadság szabad kvark-gluon gázt jósol végtelen nagy hőmérsékleten vagy sűrűségen. Azonban komoly érvek szólnak amellett, hogy infravörös problémák miatt a perturbációs számítás nem alkalmas a kvark-gluon gáz állapotegyenletének meghatározására [6, 7]. Ez meglepő annál is inkább, mert korábban azt gondolták, hogy a Debye-árnyékolás, amely véges hőmérsékleten tömeget ad a gluonoknak, megszüntet minden infravörös problémát.

Említsük meg a mértékelméletek termodinamikájának néhány érdekes alkalmazását.

Ha ismerjük a kvark-gluon rendszer állapotegyenletét, akkor ki tudjuk számítani, hogy mi van egy neutroncsillag belsejében. Elképzelhető, hogy bizonyos neutroncsillagok belsejében elég nagy a sűrűség ahhoz, hogy a neutronanyag kvark fázisba alakuljon. Ez a sűrű kvarkmag jelentősen befolyásolhatja a neutron-kvarkcsillag globális paramétereit: tömegét, sugarát, tehetetlenségi nyomatékát. Kiderülhet, hogy nagy tömegük miatt korábban fekete lyuknak gondolt csillagok, kvarkcsillagnak bizonyulnak.

A másik alkalmazás kozmológiai. Az univerzum korai forró szakaszának leírására a nagy egyesített elméletek (amelyek mértékelméletek) termodinamikájára van szükség. Eddig a kozmológiában a mértékelméleteket nagy hőmérsékleten szabad

elméletnek tekintették. Ha az előbb említett infravörös probléma valóban fennáll, és a nagy egyesített elmélet az aszimptotikus szabadság ellenére sem írható le a szabad gáz állapotegyenletével, akkor ez alapjaiban megváltoztathatja a korai univerzumból alkotott képünket.

Harmadik alkalmazásként a nehéz-ion ütközések szolgálhatnak. Ha mondjuk két uránmagot nagy energiával összelövünk, előfordulhat, hogy az ötszáz nukleonból álló rendszer rövid időre termodinamikai egyensúlyba kerül. Ha az így kialakuló hőmérséklet már a kvarkfázis hőmérséklete, a kirepülő hadronokat egy termikus kvarkokból álló gömb felrobbanásaként írhatnánk le. Ennél a példánál azonban az ember joggal érzi kétségesnek a végtelen térfogatú és egyensúlyi rendszerekre levezetett eredmények alkalmazhatóságát.

A véges hőmérsékletű térelméletnek két nagyon szép ága van, amelyeket ez a disszertáció nem tárgyal. Az egyik a szimmetriasértés véges hőmérsékleten, a másik a klasszikus megoldások és a klasszikus konfigurációk topologikus osztályozása. Amivel foglalkozni fogunk az a következőképpen tagolódik.

Az 1. fejezetben részletesen ismertetjük a pályaintegrálos formalizmust a véges hőmérsékletű mértékelméletben, és bevezetjük a termikus Wilson-hurok fogalmát, amely a kvarkbezárást jelző mennyiség véges hőmérsékleten.

A 2. fejezet a véges hőmérsékletű perturbatív QCD helyzetét próbálja áttekinteni. A hangsúly azon lesz, hogy hogyan lehet a renormcsoportot felhasználni hőmérséklettől és kémiai potenciáltól függő mennyiségek aszimptotikájának meghatározására, és hogy hol van a renormcsoport alkalmazhatóságának a határa.

A 3. fejezet az $1/g$ szerinti perturbációs számítás színterét, a rácsot mutatja be. A rács-mértékelméletek és a kontinuum mértékelméletek közti geometriai analógiákat felhasználva definiáljuk a Wilson-féle Lagrange-függvényes formalizmus és a Kogut—Susskind-féle Hamilton-operátoros formalizmus megfelelőjét véges hőmérsékleten.

A 4. fejezetben két számolásunkat foglalom össze [8, 4]. Az elsőben a maganyag-kvarkanyag rendszer fázisdiagramját határozzuk meg nagy sűrűségnél a perturbatív QCD-re, magsűrűségnél pedig a Walecka-modellre támaszkodva. A második, a már említett Monte Carlo-szimuláció, amelyben a tiszta $SU(2)$ mértékelmélet kritikus hőmérsékletét, valamint a két fázis jellegét sikerült meghatározni.

E helyen szeretnék köszönetet mondani a KFKI Részecske és Magfizikai Kutató Intézetének, hogy az eltelt két és fél évben lehetőséget adott arra, hogy az Elméleti Osztály munkatársaival együtt dolgozhassam és ezt a disszertációt elkészíthessem. Hálával tartozom témavezetőmnek, *Kuti Gyulának*, akitől nagyon sok segítséget kaptam és akit éppúgy tekinthettem munkatársamnak, mint tanáromnak. Továbbá *Polónyi Jánosnak* és *Lukács Bélának* a hasznos diszkuszióikért. Mindhármuknak azért, mert közreműködésük nélkül nem számolhatnék be a 4. fejezetben leírt munkáinkról. Megköszönöm *Bartholy Juditnak* a kézirat elkészítésében nyújtott segítségét.

1. FEJEZET

Mértékelméletek termodinamikája

Ebben a fejezetben általában mértékelméletekről fogunk beszélni, bár a fizikai kép, ami vizsgálatainkat irányítja, konkrétan a QCD.

Képzeljünk el egy hőt és kvarkokat átengedő falú tartályt, amelyben homogén kvark-gluon anyag van. Az ilyen rendszereket kívánjuk vizsgálat tárgyává tenni termodinamikai limeszben. A tartály természetesen csak szóhasználat, hiszen fizikailag nem tudnánk megvalósítani. Mégis a tartállyal megfogalmazott rendszer a statisztikus fizika alapelvei szerint ekvivalens egy igen nagy, de zárt rendszer (mikrokanonikus sokaság) kicsi, de makroszkopikus részrendszerével (makrokanonikus sokaság). Ilyen rendszer kvark-gluon anyagból már a valóságban is létezik. Például egy neutroncsillag belsejében, esetleg rövid időre nehézion ütközésekben, vagy ilyen rendszer maga a korai univerzum még homogénnek tekinthető szakaszában. A véges térfogat okozta effektusokat nem kívánjuk figyelembe venni, ezért két lényeges paraméterünk lesz: a hőmérséklet és a kvarkok barionszámához csatolódó kémiai potenciál.

A kvarkbezárás problémájának véges hőmérsékleten való vizsgálatára tiszta gluonrendszert fogunk venni két végtelen nehéz kvarkkal. Ilyenkor a kvarkokat is tartalmazó szabad energia hőmérséklet- és kvarktávolságfüggésének a meghatározása a cél. Véges kvarktömeg esetén nem tudjuk matematikailag megfogalmazni a kérdést. A nehézség az, hogy míg végtelen tömegnél ismerjük a teljes Hamilton-operátor kvarksajátfüggvényeit, mert a kvark lecsatolódik a gluonról és csak a Gauss-törvényen keresztül érzik egymást, addig véges tömegnél az egzakt sajátállapotok nem ismeretesek.

A mértékelmélet termodinamikáját a kanonikus, illetve a nagykanonikus átlagértékekkel definiáljuk. Ezek azonban mind a rendszer Hamilton-operátora segítségével vannak kifejezve. Felmerül a kérdés, hogyan lehet az átlagértékeket manifest módon mértékfüggetlenül definiálni, ha egyszer mértékelméletben Hamilton-operátor csak egy rögzített mértékben létezik.

Ennek a kérdésnek a kifejtése és megoldása az egyik célja ennek a fejezetnek (1.1.—1.3. és 1.5. szakasz). A másik, hogy értelmezze azt a mennyiséget, amelynek a tiszta gluonrendszerben vett átlagértéke előállítja a sztatikus kvarkok szabadenergiáját (1.4. és 1.4. szakasz) és amely alkalmas lesz a kvarkbezárás véges hőmérsékleti vizsgálatára.

1.1. Klasszikus mértékelméletek

Legyen ψ egy fermiontér, amely a G belső szimmetriacsoport Ω ábrázolása szerint transzformálódik:

$$\psi^\alpha(x) \rightarrow \Omega^{\alpha\beta}[g]\psi^\beta(x) \quad \alpha, \beta = 1, \dots, N_c \quad g \in G. \quad (1)$$

A fermiontér Dirac-féle Lagrange-függvénye csak x -független, azaz globális mértéktranszformációkra nézve invariáns, mert az x -függő, azaz lokális mértéktranszformációk a (különböző x pontokat összekötő) deriváltakat tartalmazó tagokat megvál-

toztatják. Ahhoz, hogy lokálisan is mértékinvariáns elméletünk legyen, a deriváltaknak is transzformációs tulajdonságot kell posztulálnunk, vagyis a párhuzamos eltolást kell nem triviálissá tenni. Ez új terek, az ún. mértékterek vagy differenciálgeometriai nyelven konnektió bevezetését jelenti. Jelöljük ezeket az új tereket A_μ^a -val ($a = 1, \dots, N_g \equiv \dim G$) A párhuzamos eltolást a P pályán az

$$U_P = \mathcal{P} \exp \left\{ ig \int_P dx^\mu A_\mu^a(x) T_a \right\}$$

mátrix hajtja végre, ahol \mathcal{P} pálya menti rendezést jelent, T_a -k pedig G generátorai az Ω ábrázolásban:

$$[T_a, T_b] = if_{abc} T_c \quad \text{tr} T_a T_b = \frac{1}{2} \delta_{ab}.$$

A kovariáns deriválás az infinitezimális párhuzamos eltolással írható fel:

$$\nabla_\mu = \partial_\mu - ig A_\mu^a T_a.$$

Lokális mértéktranszformációra, miközben a fermiontér (1) módon, de x -függő g -vel transzformálódik, U_P és ∇_μ transzformációja:

$$\begin{aligned} U_P &\rightarrow \Omega(x_f) U_P \Omega^{-1}(x_i) \\ \nabla_\mu &\rightarrow \Omega(x) \nabla_\mu \Omega^{-1}(x), \end{aligned} \quad (2)$$

ahol x_i és x_f a P pálya kezdő- és végpontja, és az egyszerűség kedvéért a (2)-től kezdve nem tüntetjük fel, hogy Ω a g -n keresztül függ az x -től. (2)-ből a mértéktér transzformációja az $\Omega = e^{ig\omega^a T_a}$ hatására

$$A_\mu^a \rightarrow (A_\mu^\Omega)^a = [e^{ig\omega^c \mathcal{T}_c}]_{ab} (\partial_\mu \omega^b + A_\mu^b), \quad (3)$$

ahol $[\mathcal{T}_c]_{ab} = -if_{abc}$ a G generátora az adjungált ábrázolásban. (3) infinitezimális megfelelője:

$$(A_\mu^\Omega)^a = A_\mu^a + D_\mu^{ab} \omega^b + O(\omega^2),$$

ahol

$$D_\mu^{ab} = \delta^{ab} \partial_\mu - ig [\mathcal{T}_c]^{ab} A_\mu^c = \delta^{ab} \partial_\mu - gf^{abc} A_\mu^c$$

a kovariáns deriválás az adjungált ábrázolás szerint transzformálódó tereken.

A mértéktér dinamikáját megadó Lagrange-függvény nem más, mint a legegyszerűbb lokálisan mértékinvariáns objektum: a térerősség vagy görbületi tenzor négyzete [9].

$$L_{Y.M.} = \int d^3x \mathcal{L}_{Y.M.} \quad \mathcal{L}_{Y.M.} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a}.$$

Az $F_{\mu\nu}$ görbületi tenzor geometriai jelentésénél fogva az infinitezimális zárt görbén való párhuzamos eltolással kapcsolatos, ezért felírható a kovariáns deriválások kommutátoraként:

$$[\nabla_\mu, \nabla_\nu] = -ig F_{\mu\nu}^a T_a \quad [D_\mu, D_\nu] = -ig F_{\mu\nu}^a \mathcal{T}_a \quad (4)$$

ahonnan

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc} A_\mu^b A_\nu^c.$$

A fermionokhoz csatolt Yang—Mills-elmélet Lagrange-függvénye tehát:

$$L = \int d^3x \left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} + i\bar{\psi}^\alpha \nabla_\mu^{\alpha\beta} \gamma^\mu \psi^\beta - m\bar{\psi}^\alpha \psi^\alpha \right). \quad (5)$$

Az (5) Lagrange-függvényből származó Euler—Lagrange-egyenletek:

$$(i\gamma^\mu \nabla_\mu^{\alpha\beta} - \delta^{\alpha\beta} m) \psi^\beta = 0 \quad (6)$$

$$D_\mu^{ab} F^{\mu\nu b} = -g J^{\nu a} \quad (\equiv -g \bar{\psi}^\alpha \gamma^\nu T_a^{\alpha\beta} \psi^\beta). \quad (6')$$

A (6') alatti egyenletek két Maxwell-egyenlet nem ábeli általánosításaként foghatók fel. A másik két Maxwell-egyenlet általánosítása a Bianchi-azonosságból adódik:

$$D_\lambda^{ab} F_{\mu\nu}^b + D_\mu^{ab} F_{\nu\lambda}^b + D_\nu^{ab} F_{\lambda\mu}^b = 0.$$

1.2. A Hamilton-formalizmus

A (6') mozgásegyenletek a lokális mértékszimmétria miatt az A_μ^a -kra és sebességeikre kirótt kezdőfeltétel esetén sem határozzák meg egyértelműen az A_μ^a -k időfejlődését. Ez a tény az (5) Lagrange-függvény szinguláris voltával van kapcsolatban [10]. Az $A_\mu^a(\mathbf{x})$ -hez kanonikusan konjugált impulzus

$$E_\mu^a(\mathbf{x}) = \frac{\delta L}{\delta \partial_0 A_\mu^a(\mathbf{x})} = F^{\mu 0a}(\mathbf{x}).$$

Primér kényszereink tehát $\chi_1^a(\mathbf{x}) = E_0^a(\mathbf{x}) = 0$. A Hamilton-függvény csak primér kényszerek erejéig meghatározott:

$$\begin{aligned} H &= \int d^3x [E_\mu^a(\mathbf{x}) \partial_0 A_\mu^a(\mathbf{x}) + \bar{\Pi}^\alpha(\mathbf{x}) \partial_0 \psi^\alpha(\mathbf{x}) + \partial_0 \bar{\psi}^\alpha(\mathbf{x}) \Pi^\alpha(\mathbf{x})] - L = \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} [E_i^a(\mathbf{x})]^2 + \frac{1}{2} [B_i^a(\mathbf{x})]^2 - A_0^a(\mathbf{x}) [D_i^{ab} E_i^b(\mathbf{x}) + g J_0^a(\mathbf{x})] - g J_i^a(\mathbf{x}) A_i^a(\mathbf{x}) + \right. \\ &\quad \left. + C^a(\mathbf{x}) \chi_1^a(\mathbf{x}) \right\} + H_F, \end{aligned} \quad (7)$$

ahol $B_i^a = -\frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} F_{jk}^a$ és H_F a fermionok szabad Hamilton-függvénye, C^a tetszőleges dinamikai változó. A fermionok Lagrange-függvénye szintén szinguláris a Dirac-féle értelemben, az ezzel kapcsolatos procedúrát nem írjuk le részletesen, csak megemlítjük, hogy a fermionoknál két primér kényszer van, amelyek másodosztályúak, s így a Hamilton-függvény alakját egyértelművé teszik.

Ahhoz, hogy a χ_1 kényszer minden időben fennálljon, szükséges, hogy

$$\chi_2^a(\mathbf{x}) = \{H, \chi_1^a(\mathbf{x})\} = D_i^{ab} E_i^b(\mathbf{x}) + g J_0^a(\mathbf{x}) = 0$$

legyen. A χ_2 szekundér kényszer éppen a Gauss-törvény nem ábeli elméletben. $\chi_2=0$ már időben megmarad a mértékinvariancia következményeként. A χ_1, χ_2 kényszerrendszer első osztályú, mert egymással és a Hamilton-függvénnyel gyengén nulla Poisson-zárójelet adnak.

A (7)-ből adódó Hamilton-egyenletek és a χ_1, χ_2 kényszerek együtt megadják a (6), (6') Euler—Lagrange-egyenleteket, és ezen felül még A_0 mozgásegyenletét, amely elsőrendűnek bizonyul. A C tetszőleges változó csak A_0 mozgásegyenletében

jelenik meg, és rögzítése az időfüggő mértéktranszformációkat szünteti meg. Ezért a Hamilton-mozgásegyenletek a kényszerekkel konzisztens kezdőfeltételekkel már egyértelműen oldhatók meg. Az időfüggetlen mértéktranszformációk megmaradnak az elméletben, mint szimmetriák. Ezek megszüntetése — egy újabb kényszerrel — rögzítené teljesen a mértéket.

1.3. Kvantálás mértékrögzítés nélkül

Dirac módszerét [10] követve a Poisson-zárójeleknek kommutátorokat feleltünk meg: $\{, \} \rightarrow i[,]$. A fizikai állapotok alterét pedig a $\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2$ kényszer operátorok közös nulla sajátértékű altereként definiáljuk:

$$\hat{\chi}_1^a(\mathbf{x})|\psi_{\text{fiz}}\rangle = 0 \quad \hat{\chi}_2^a(\mathbf{x})|\psi_{\text{fiz}}\rangle = 0.$$

Írjuk át ezeket a feltételeket funkcionálrepresentációba. Röviden funkcionálrepresentációnak fogjuk nevezni a bozonok térdiagonális funkcionálrepresentációjának és a fermionok Grassman-algebrai reprezentációjának (lásd az 1. Függelék) direkt szorzatát. Minden $\Phi(A_\mu, \psi^+)$ állapot kifejezhető $\Phi(A_\mu)f(\psi^+)$ alakú „funkcionálok” szorzataként, ahol Φ komplex funkcionál a mértékterek sokaságán, $f(\psi^+)$ pedig az 1. Függelékben definiált Grassman-algebra elem. Ebben a reprezentációban a fizikai állapotokra vonatkozó feltétel így írható:

$$-i \frac{\delta}{\delta A_0^a} \Phi(A_\mu, \psi^+) = 0 \quad (8)$$

$$\left\{ D_i^{ab}(A) \left[-i \frac{\delta}{\delta A_i^a} \right] - g \psi^{+\alpha} T_a^{\alpha\beta} \frac{\delta}{\delta \psi^{+\beta}} \right\} \Phi(A_\mu, \psi^+) = 0.$$

Az első egyenlet szerint Φ_{fiz} nem függ A_0 -tól. A második egyenlet a funkcionál invarianciáját fejezi ki időfüggetlen mértéktranszformációkkal szemben. A (8) differenciálegyenlet általános megoldása megkapható a \hat{P} fizikai alterre vetítő operátor segítségével:

$$\Phi_{\text{fiz}}(A_\mu, \psi^+) = [P\Phi](A_\mu, \psi^+) \quad \Phi \text{ tetszőleges} \\ P = \int D\Omega V(\Omega) \cdot \int DA_0, \quad (9)$$

ahol a $V(\Omega)$ unitér operátor a Ω időfüggetlen lokális mértéktranszformációkat ábrázolja az állapotok terén. Mivel a $\hat{G}^a(\mathbf{x}) = \frac{1}{g} \hat{\chi}_2^a(\mathbf{x})$ operátorok kielégítik a lokális generátorok felcserélési törvényét,

$$[\hat{G}^a(\mathbf{x}), \hat{G}^b(\mathbf{y})] = if^{abc} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) \hat{G}^c(\mathbf{y})$$

ezért

$$\hat{V}(\Omega) = \exp \left\{ i \int d^3\mathbf{x} \omega^a(\mathbf{x}) [D_i^{ab}(\hat{A}) \hat{E}_i^b(\mathbf{x}) + g \hat{J}_0^b(\mathbf{x})] \right\},$$

ahol az $\Omega(\mathbf{x}) = \exp[ig\omega^a(\mathbf{x})T_a]$ paraméterezést használtuk. Megjegyezzük, hogy a (9) alatti DA_0 integrálba beleértünk egy olyan normálási faktort, amely projekciós operátorra teszi \hat{P} -t, továbbá, hogy (9)-ben csak a térben véges tartójú időfüggetlen Ω mértéktranszformációkra integrálunk.

Utóbbi követelményünket a QCD-re való alkalmazás motiválja. Ha (9)-ben megengednénk az $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ -ben nem egységhez tartó Ω -kat, akkor a fizikai állapotteret nem kívánt módon leszűkítenénk annak valamely alterére. Például, ha az $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ -ben konstans Ω_0 -hoz tartó mértéktranszformációkra is integrálnánk (9)-ben, akkor ezzel a globális mértéktranszformációkra nézve is invariáns állapotokra, tehát a szín-szinglett alterre proiciálnánk. Márpedig nagy hőmérsékleten a szabad kvark-gluon gáz bármilyen szintöltéssel rendelkezhet. Ha pedig az $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ -ben tetszőleges mértéktranszformációkat is megengednénk, akkor nem volna fizikai állapot az egy kvark és a belőle kiinduló, végtelenbe futó fluxuscső.

Még egy megjegyzés (9)-cel kapcsolatban: A $D\Omega$ mérték (9)-ben bal- és jobb-invariáns az \mathbf{x} -függő mértéktranszformációk csoportján:

$$\int D\Omega f(\Omega\Omega_1) = \int D\Omega f(\Omega_1\Omega) = \int D\Omega f(\Omega). \quad (10)$$

Ez a mérték nem tévesztendő össze — ahogy az irodalomban előfordul [7] — az \mathbf{x} -függő mértékcsoport Lie-algebráján értelmezett $D\omega$ mértékkel, amely csak az $\omega^a T_a \rightarrow \Omega_1 \omega^a T_a \Omega_1^{-1}$ belső automorfizmusokra nézve invariáns:

$$\int D\omega f([e^{ig\omega_c^a T_a}]_{ab} \omega^b) = \int D\omega f(\omega^a).$$

Hangsúlyozzuk, ahhoz, hogy \hat{P} projekcióval legyen arányos, a (10) tulajdonságra van szükség.

1.4. Termodinamika

Ebben a szakaszban mértékelméletünket QCD-re specifikáljuk. A G mértékcsoport tehát a szín — $SU(3)$ csoport, és mértékbozonok, illetve fermionok helyett gluonokról, illetve kvarkokról fogunk beszélni.

Képzeljük el, hogy a (7) Hamilton-operátorral és a (9) projekciós operátorral definiált kvantumrendszerünket hő- és részecskeközlő tartályba helyezzük. A részecskeközlést az N megmaradó töltéshez csatolt μ kémiai potenciál kormányozza. Minthogy a szintöltéshez nem akarunk csatolást létesíteni, ezért N csak a kvark-terekből épül fel. A gyakorlati alkalmazásokban N a bariontöltés. A kvantumstatistika szerint egy \hat{A} operátor átlagértéke ebben a rendszerben

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr } \hat{Q}(T, V, \mu) \hat{A} / Y(T, V, \mu), \quad (11)$$

ahol a sűrűségoperátor $\hat{Q} = \hat{P} \exp \{ -\beta(\hat{H} - \mu\hat{N}) \} \hat{P}$, $\beta = 1/T$ a reciprok hőmérséklet. Az $Y = \text{Tr } \hat{Q}$ nagykanonikus állapotösszeg és az I nagykanonikus termodinamikai potenciál közötti kapcsolat: $Y = e^{-\beta I}$

A \hat{Q} definíciójában megjelenő, a fizikai alterre vetítő \hat{P} operátor lehetővé teszi, hogy (11)-ben a spurt az egész Hilbert-térre vegyük, ami gyakorlati szempontból előnyös.

Az I állapotösszeg termodinamikai limitben ($V \rightarrow \infty$) arányossá válik a térfoggal és könnyű látni, hogy az arányossági tényező éppen a nyomás (-1) -szerese.

$$I(T, V, \mu) = -p(T, \mu)V.$$

Az entrópia- és barionsűrűség,

$$s = \frac{\partial p(T, \mu)}{\partial T} \quad n = \frac{\partial p(T, \mu)}{\partial \mu}$$

pozitivitásából következően p monoton növekvő mindkét változójában, a termodinamikai fluktuációkkal szembeni stabilitás feltételezéséből pedig az következik, hogy $p(T, \mu)$ mint kétváltozós függvény, alulról konvex.

Ha kvarkok nélküli QCD-t vizsgálunk, a megfelelő definíciók:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr } \hat{Q}(T, V) \hat{A} / Z(T, V)$$

$$\hat{Q}(T, V) = \hat{P} e^{-\beta \hat{H}} \hat{P}$$

$$Z(T, V) = \text{Tr } \hat{Q}(T, V) \quad \text{a kanonikus állapotösszeg,}$$

$$F(T, V) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(T, V)$$

a szabad energia.

A kvarkbezárás vizsgálata szempontjából érdekes lesz a sztatikus kvark-antikvark pár és az őket körülvevő gluon-közeg állapotösszegéről $Z_{q\bar{q}}(T, V, |\mathbf{x}_q - \mathbf{x}_{\bar{q}}|)$ -ról beszélni. Az ebből származtatott szabad energia függése a kvark-antikvark távolságtól árulkodik arról, hogy a gluon-közeg bezáró vagy nem bezáró fázisban van.

Az $F(T, V, r)$ szabad energia r szerinti deriváltja az izotermikus tenzió:

$$\sigma = \frac{\partial F}{\partial r}.$$

Nevezzük bezáró fázisnak azt, ahol σ -nak pozitív alsó korlátja van minden pozitív r értékre. Speciálisan lineáris erőtvény esetén $\sigma = \text{const.} > 0$.

A belső energia $E(S, V, r) = F - T \frac{\partial F}{\partial T}$, ahol $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ az entrópia. Az adiabatikus tenzió definíciója: $\tau = \frac{\partial E}{\partial r}$. Könnyű látni, hogy $\tau = \sigma$ mindenhol. Tehát a bezárás a belső energiában és a szabad energiában egyszerre és ugyanúgy jelenik meg; abban, hogy mindketten a kvarktávolság növelésével minden határon túl nőnek.

1.5. Az állapotösszeg előállítása funkcionálintegrállal

Amint az előző paragrafusban láttuk, a fizikai mennyiségek termodinamikai átlagértékének kiszámításához elegendő a Hamilton-operátor megadása a fizikai altéren. Legyen ezért

$$\hat{H} = \int d^3\mathbf{x} \left\{ \frac{1}{2} [\hat{E}_i^a(\mathbf{x})]^2 + \frac{1}{2} [\hat{B}_i^a(\mathbf{x})]^2 - g J_i^a(\mathbf{x}) \hat{A}_i^a(\mathbf{x}) \right\} + \hat{H}_F = \hat{H}_{YM} + \hat{H}_I + \hat{H}_F. \quad (12)$$

Ez az operátor a fizikai altéren megegyezik a (7) alattival, bármi legyen is a C . Ezt a Hamilton-operátort fogjuk behelyettesíteni a nagykanonikus állapotösszeg definíciójába.

$$Y = \text{Tr } \hat{P} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}.$$

Most pedig térjünk rá az állapotösszeg funkcionálintegrállal való előállítására. A levezetés a szokásos kvantummechanikai levezetés [11] mintájára történik, csupán két dologra hívnám fel a figyelmet. Ez a levezetés egyrészt — minthogy a Hamilton-operátorban mértékrögzítés nem történt — mértékfüggetlen eredményt szolgáltat, másrészt minden lépésében a fermionokat és a bozonokat egységesen kezeli.

Először számítsuk ki $\hat{H} - \mu\hat{N}$ mátrixelemeit a funkcionálábrázolás bázisában (ld. az 1. Függelék).

$$\begin{aligned} \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{H} - \mu\hat{N} | A' \rangle | \chi \rangle &= \int DE_\mu \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{H} - \mu\hat{N} | E \rangle \langle E | A' \rangle | \chi \rangle = \\ &= \int \frac{DE_\mu}{(2\pi)^f} \{ H_{YM}(E, A) + H_I(\vartheta^+, \chi, A) + K(\vartheta^+, \chi) \} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ \int d^3 \mathbf{x} \vartheta^+ \chi + i \int d^3 \mathbf{x} E_\mu^a (A_\mu^a - A'^a) \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

ahol $|E\rangle$ az \hat{E}_μ^a operátorok közös ortonormált sajátvektor rendszere:

$$|E\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{f/2}} \int DA_\mu e^{i \int E_\mu^a A_\mu^a d^3 \mathbf{x}} |A\rangle$$

f a mértékbozonok összes (fizikai + mérték) szabadságfokainak a száma, bevezetjük a $\hat{K} = \hat{H}_F - \mu\hat{N}$ operátort és a H_{YM} , H_I , illetve K funkcionálok alakja a (12)-ből és az alábbi definíciókból leolvasható:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{YM} &= H_{YM}(\hat{E}, \hat{A}) \\ \hat{H}_I &= H_I(\hat{\psi}^+, \hat{\psi}, \hat{A}) \\ \hat{K} &= K(\hat{\psi}^+, \hat{\psi}) \end{aligned}$$

(13)-ból következik, hogy

$$\begin{aligned} \langle \vartheta^+ | \langle A | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | A' \rangle | \chi \rangle &= \int \frac{DE_\mu}{(2\pi)^f} \exp \left\{ -\varepsilon [H_{YM}(E, A) + H_I(\vartheta^+, \chi, A) + \right. \\ &\quad \left. + K(\vartheta^+, \chi)] + \int d^3 \mathbf{x} [\vartheta^+ \chi + i E_\mu^a (A_\mu^a - A'^a)] \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Szükségünk lesz a (9) projekciós operátor mátrixelemeire is.

$$\begin{aligned} \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{P} | A' \rangle | \chi \rangle &= \int D\Omega \langle \vartheta^+ | \langle A_i | \hat{V}(\Omega) | A'_i \rangle | \chi \rangle = \\ &= \int D\Omega \langle \vartheta^+ | \langle A_i | A'_i{}^\Omega \rangle | \Omega \chi \rangle = \int D\Omega e^{\vartheta^+ \Omega \chi} \delta(A_i - A'_i{}^\Omega) \end{aligned} \quad (15)$$

(14) és (15) összevetéséből:

$$\begin{aligned} \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | A' \rangle | \chi \rangle &= \int D\psi^+ D\psi DA''_\mu \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{P} | A'' \rangle | \psi \rangle e^{-\psi^+ \psi} \times \\ &\times \langle \psi^+ | \langle A'' | e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu\hat{N})} | A' \rangle | \chi \rangle = \int D\psi^+ D\psi DA''_\mu D\Omega e^{\vartheta^+ \Omega \psi} \delta(A_i - A'_i{}^\Omega) e^{-\psi^+ \psi} \times \\ &\times \int \frac{DE_\mu}{(2\pi)^f} \exp \left\{ -\varepsilon [H_{YM}(E, A'') + H_I(\psi^+, \chi, A'') + K(\psi^+, \chi)] + \right. \\ &\quad \left. + \int d^3 \mathbf{x} [\psi^+ \chi + i E_\mu^a (A''^a - A'^a)] \right\} = \\ &= \int D\psi^+ D\psi D\Omega e^{\vartheta^+ \Omega \psi - \psi^+ \psi} \int \frac{DE_i}{(2\pi)^{3f/4}} \exp \left\{ -\varepsilon H_{YM}(E, A^{\Omega^{-1}}) + H_I(\psi^+, \chi, A^{\Omega^{-1}}) + \right. \\ &\quad \left. + K(\psi^+, \chi) + \int d^3 \mathbf{x} [\psi^+ \chi + i E_j^a (A_j^{\Omega^{-1}} - A'_j{}^a)] \right\}. \end{aligned}$$

Az E_i szerinti integrál egy Gauss-integrál. A ψ^+ és ψ szerinti integrál pedig az

$$\int D\psi^+ D\psi e^{-\psi^+ \psi} e^{\psi^+ \psi} e^{\psi^+ \chi} = e^{\psi^+ \chi}$$

azonosság segítségével végezhető el. Végül is

$$\begin{aligned} & \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | A' \rangle | \chi \rangle = \\ & = \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon} \right)^{3f/8} \int D\Omega \exp \left\{ -\varepsilon \int d^3 \mathbf{x} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{A_j^{\Omega-1} - A'_j}{\varepsilon} \right)^2 + \frac{1}{2} (B_i^a)^2 - g (A_j^{\Omega-1})^a \vartheta^+ \alpha_j T_a \chi \right] - \right. \\ & \quad \left. - \varepsilon K(\vartheta^+, \chi) + \int d^3 \mathbf{x} \vartheta^+ \chi \right\} \end{aligned}$$

Vezessünk be Ω paraméterezésébe is egy ε -t: $\Omega = \exp(ig\varepsilon\omega^a T_a)$. Ekkor a $D\Omega$ csoport mérték helyébe $D\Omega = \prod_x d\Omega(x) = \prod_x [(d\omega(x) + O(\varepsilon^2))(gk_G)^{N_\theta}] = (D\omega + O(\varepsilon^2))(gk_G)^{f/4}$

írandó, ahol k_G a csoporttól függő szám. Pl.: $k_{SU(2)} = (4\pi)^{-2/3}$. ε -ban vezető rendben tehát az írhatjuk, hogy:

$$\begin{aligned} & \langle \vartheta^+ | \langle A | \hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | A' \rangle | \chi \rangle = (gk_G)^{f/4} \left(\frac{1}{2\pi\varepsilon} \right)^{3f/8} \int D\omega \times \\ & \times \exp \left\{ -\varepsilon \int d^3 \mathbf{x} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{A_j^a - A'_j{}^a}{\varepsilon} - D_j^{ab}(A) \omega^b \right)^2 + \frac{1}{2} (B_j^a)^2 - g A_j^a \vartheta^+ \alpha_j T_a \chi \right] - \right. \\ & \quad \left. - \varepsilon K(\vartheta^+, \chi) + \int d^3 \mathbf{x} \vartheta^+ \chi \right\} \end{aligned} \quad (16)$$

(16) segítségével a teljes állapotösszeg felírható. Legyen $\varepsilon = \beta/n$, akkor:

$$\begin{aligned} & \text{Tr } \hat{P} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} = \lim_{n \rightarrow \infty} [\hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})}]^n = \\ & = \int D\psi^+(n) D\psi(n) D A_\mu(n) \dots \int D\psi^+(1) D\psi(1) D A_\mu(1) e^{-\int d^3 \mathbf{x} [\psi^+(n) \psi(n) + \dots + \psi^+(1) \psi(1)]} \times \\ & \quad \times \langle \psi^+(n) | \langle A_\mu(n) | \hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | A_\mu(n-1) \rangle | \psi(n-1) \rangle \dots \\ & \quad \dots \cdot \langle \psi^+(1) | \langle A_\mu(1) | \hat{P} e^{-\varepsilon(\hat{H} - \mu \hat{N})} | A_\mu(n) \rangle | -\psi(n) \rangle = \\ & = \int D\psi^+(n) D\psi(n) D A_\mu(n) \dots \int D\psi^+(1) D\psi(1) D A_\mu(1) \cdot \mathcal{N}_n(\beta) \times \\ & \times \exp \left\{ -\varepsilon \sum_{k=1}^n \int d^3 \mathbf{x} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{A_j^a(k) - A_j^a(k-1)}{\varepsilon} - D_j^{ab}(A(k)) A_0^b(k) \right)^2 + \frac{1}{2} (B_j^a(k))^2 - \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - g A_j^a(k) \psi^+(k) \gamma^0 \gamma^j T_a \psi(k-1) \right] - \right. \\ & \quad \left. - \varepsilon \sum_{k=1}^n K(\psi^+(k), \psi(k-1)) - \varepsilon \sum_{k=1}^n \int d^3 \mathbf{x} \psi^+(k) \frac{\psi^+(k) - \psi(k-1)}{\varepsilon} \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

ahol $A_j^a(0) = A_j^a(n)$ és $\psi(0) = -\psi(n)$. Az utolsó egyenlőségnél két dolog történt. Egyrészt elvégeztük az $A_0(k)$ szerinti integrálokat, amelyek 1-et adtak az $\int D A_0 = 1$

normálás miatt, amelyet P definíciójánál rögzítettünk; másrészt átjelöltük ω^a -t A_0^a -ra. Az $\mathcal{N}_n(\beta)$ konkrét alakja a következő:

$$\mathcal{N}_n(\beta) = [(gk_G)^{1/4} (2\pi)^{-3/8} (\beta/n)^{-1/8}]^{fn}$$

(17)-et formálisan így írhatjuk:

$$Y = \text{Tr } \hat{P} e^{-\beta(H - \mu N)} = \mathcal{N}(\beta) \int_{\substack{\psi^+(\beta) = -\psi^+(0) \\ \psi(\beta) = -\psi(0) \\ A_\mu(\beta) = A_\mu(0)}} D\psi + D\psi D A_\mu \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\tau, x) \right\} \quad (18)$$

ahol \mathcal{L}_E az euklideszi Lagrange-sűrűség:

$$\mathcal{L}_E = \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \bar{\psi}^\alpha (i\gamma_\mu^E \nabla_\mu^{\alpha\beta} + m\delta^{\alpha\beta}) \psi^\beta - i\mu \bar{\psi}^\alpha \gamma_0^E \psi^\alpha \quad (19)$$

a $\gamma_0^E = -i\gamma^0$, $\gamma_j^E = -\gamma^j$ euklideszi γ -mátrixokkal.

A levezetés explicite mutatja, hogy az állapotösszeget előállító funkcionálintegrálba a bozonterek β „időre” periodikus konfigurációi, a Grassman-értékű fermiontereknek pedig a β „időre” antiperiodikus konfigurációi adnak járulékot. A térszerű végtelenben az A_0 térre zérus határfeltétel van kiszabva (ld. a (9) utáni megjegyzést.)

1.6. A sztatikus kvark limesz

A kvarkbezárás problémája véges hőmérsékleten könnyebben tanulmányozható, ha az általános (18) probléma helyett az egy kvark, egy antikvark szektorra korlátozódunk midőn a kvarktömeg végtelenhez tart. Erre az ad lehetőséget, hogy — mint látni fogjuk — az $m \rightarrow \infty$ limeszben a Hamilton-operátornak invariáns altere az egy kvark, egy antikvark altér. Sőt a kvarkok térbeli helyét és spinjét is rögzíthetjük, azok időben nem fognak változni. Vizsgáljuk tehát a rögzített helyű és spinű, de a színtérben forgó kvark-antikvark párból és a hozzá csatolt fluktuáló gluontérből álló rendszer állapotösszegét, amiből a szabad vagy a belső energia egyszerű termodinamikai transzformációkkal nyerhető. Hogy az adott hőmérsékleten (sűrűségről 2 kvark esetén nem beszélhetünk) bezáró vagy szabad fázisban vagyunk-e, azt a szabad vagy a belső energia távolságfüggéséből olvashatjuk le. A bezáró fázisban lineáris, a szabad fázisban Coulomb-szerű távolságfüggést várunk. Az 1.4.-ben beláttuk, hogy ez a kritérium a szabad és a belső energiára ugyanaz.

Először keressük meg a Dirac-egyenlet megoldásait $m \rightarrow \infty$ esetén.

$$(\gamma^\mu p_\mu - m)\psi(p) = 0 \quad m \rightarrow \infty.$$

Legyen $\psi(p) = \begin{pmatrix} \chi(p) \\ \eta(p) \end{pmatrix}$, akkor a Dirac-egyenletből

$$\psi(p) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \frac{p_0 - \mathbf{p}\boldsymbol{\sigma}}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi(p) \\ \eta(p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi(p) \\ \pm \chi(p) \end{pmatrix} + O\left(\frac{|\mathbf{p}|}{m}\right)$$

mert a $p_0 = \pm m(1 + 0(|\mathbf{p}|/m))$ sajátértékek a pozitív, illetve a negatív energiás szektorban teljesen elfajultak. Jelöljük a pozitív, illetve negatív energiás alpmegoldásokat u_s -sel illetve v_s -sel. s a spint indexeli.

$$u_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_1(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_2(\mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Ezen okulva fejtsük ki a $\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x})$ téroperátort ezen bázis szerint:

$$\hat{\psi}^\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{p} [e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{b}_s^\alpha(\mathbf{p}) u_s(\mathbf{p}) + e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{d}_s^{+\alpha}(\mathbf{p}) v_s(\mathbf{p})].$$

Minthogy az összes különböző impulzusú állapot elfajult, ezért akármilyen alakú hullámfüggvény stacionárius. Legyen ez $\delta(\mathbf{x})$, és definiáljuk az \mathbf{x} helyen rögzített, s spinű, α színű kvark- és antikvark-állapotot.

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{b}_s^\alpha(\mathbf{p}) |0\rangle = |\mathbf{x}, s, \alpha\rangle$$

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \hat{d}_s^{+\alpha}(\mathbf{p}) |0\rangle = |\overline{\mathbf{x}}, s, \alpha\rangle.$$

Hasonlóan kapjuk a rögzített helyű, spinű és színű kvark-antikvark állapotot:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{p}' e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x} - i\mathbf{p}'\mathbf{x}'} \hat{b}_s^\alpha(\mathbf{p}) \hat{d}_s^{+\alpha'}(\mathbf{p}') |0\rangle = |\mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha'\rangle.$$

a $\hat{J}_\mu^a(\mathbf{z})$ áram mátrixelemei ilyen állapotok között:

$$\begin{aligned} &\langle \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' | \hat{J}^{\mu a}(\mathbf{z}) | \mathbf{y}, r, \beta; \overline{\mathbf{y}'}, r', \beta' \rangle = \\ &= \delta_0^\mu \delta_{sr} \delta_{s'r'} [T_a^{\alpha\beta} \delta^{\alpha'\beta'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{z}) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y}) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{y}') - \\ &\quad - \delta^{\alpha\beta} T_a^{\beta'\alpha'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{z}) \delta(\mathbf{z} - \mathbf{y}')]. \end{aligned} \quad (20)$$

Tekintsük tehát a végtelen tömegő fermionokból álló rendszerünket és csatoljuk hozzá a \hat{J}_μ^a áram segítségével az \hat{A}_μ^a gluonoperátorhoz, ahogy azt a (12) Hamilton-operátor teszi. Számítsuk ki ezzel az időfejlesztő operátor mátrixelemeit

$$\begin{aligned} &\langle A | \langle \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' | e^{-i\hat{H}t} | \mathbf{y}, r, \beta; \overline{\mathbf{y}'}, r', \beta' \rangle | A' \rangle = \langle A | e^{-i\hat{H}_{YM}t} | A' \rangle \times \\ &\times e^{-2imt} \langle \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' | T \exp \left\{ -i \int_0^t \hat{H}_I(\tau) d\tau \right\} | \mathbf{y}, r, \beta; \overline{\mathbf{y}'}, r', \beta' \rangle, \end{aligned} \quad (21)$$

ahol $\hat{H}_I(\tau)$ a kölcsönhatási \hat{H}_I Hamilton-operátor abban a Dirac-képben, amelyet a $\hat{H}_{YM} + \hat{H}_F$ mint „szabad” Hamilton-operátor definiál. Fejtsük ki az időrendezett exponenciálst, és tegyük minden két szomszédos $\hat{H}_I(\tau)$ közé egy teljes rendszert. $\hat{H}_I - 2$ -vel, 0-val vagy $+2$ -vel változtatja a részecskeszámot. A ± 2 -vel különböző

részecskeszámú állapotok közötti mátrixelem $e^{\pm 2im\tau}$ -val arányos és amikor ezt az időrendezett exponenciális kifejtésében 0-tól t -ig integráljuk, akkor egy $(e^{\pm 2imt} - 1)/(\pm 2im)$ energianevezőt kapunk, ami $m \rightarrow \infty$ limitben eltűnik. Tehát a részecskeszám időben állandó (nincs párkeltés), elegendő az $|\mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha'\rangle$ típusú állapotok terén ismerni a mátrixelemeket, amelyeket lényegében már kiszámítottunk (20)-ban. (20)-ból látható, hogy a kölcsönhatás megőrzi a kvark és antikvark helyét és spinjét, csupán a színtérben hat nem triviálisan.

Valaki kifogásolhatja — és akkor igaza van —, hogy következtetésünket az $e^{-i\hat{H}t}$ mátrixelemeiből vontuk le, pedig az igazi időfejllesztő operátor ennek a fizikai altérre való projekciója. Érvelésünk korrekté válik, ha meggondoljuk, hogy a (9) alatti \hat{P} operátor megőrzi a fermion-szektor részecskeszámát. Tudniillik \hat{P} mértéktranszformációk összege, és egy mértéktranszformáció csupán a színtérben forgatja el a fermionokat. Például:

$$\hat{V}(\Omega)|A\rangle|\mathbf{x}, s, \alpha\rangle = |A^\Omega\rangle\Omega^{\alpha\beta}(\mathbf{x})|\mathbf{x}, s, \beta\rangle.$$

Ezek után (20) felhasználásával minden nehézség nélkül kiszámíthatnánk a (21) átmeneti amplitúdót. Azonban a véges hőmérsékletre való alkalmazáskor ezen az eredményen egy euklideszi térbe való analitikus folytatást kellene végrehajtanunk, amelynek jogossága nem nyilvánvaló és amely nem is szemléletes. Ehelyett az 1.5.-beli levezetést ismételjük meg $\mu=0$ esetén a rögzített helyű és spinű kvark-antikvark szektorban.

Minthogy a $\hat{J}_i \hat{A}_i$ kölcsönhatási Hamilton-operátor ebben a szektorban 0 (ld. a (20) képletet), a \hat{H}_F szabad Hamilton-operátor egyszerűen a $2m$ -mel való szorzás, az egyetlen nem triviális rész a \hat{P} projekciós operátor hatása.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' | \langle A | \hat{P} | A' \rangle | \mathbf{y}, r, \beta; \overline{\mathbf{y}'}, r', \beta' \rangle = \\ = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{y}') \delta_{sr} \delta_{s'r'} \int D\Omega \delta(A_i - A_i'^\Omega) \Omega^{\alpha\beta}(\mathbf{x}) \Omega^{\alpha'\beta'}(\mathbf{x}') \end{aligned}$$

(* a komplex konjugálás).

Ezt a mátrixelemet felhasználva az 1.5.-beli levezetés megismételhető és mivel Ω -ból az A_0 exponenciálisa lesz, azt kapjuk, hogy $m \rightarrow \infty$ limeszben a kvark-antikvark szektor állapotösszege:

$$\begin{aligned} Z_{q\bar{q}}(T, V, \mathbf{x}, s; \mathbf{x}', s') = \sum_{\alpha, \alpha'} \int DA_\mu \langle \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' | \langle A | \hat{P} e^{-\beta \hat{H}} | A' \rangle | \mathbf{x}, s, \alpha; \overline{\mathbf{x}'}, s', \alpha' \rangle = \\ = \frac{1}{v_q^2} e^{-2m\beta} \mathcal{N}(\beta) \int \mathcal{D}A_\mu e^{-\int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \frac{1}{4} (F_{\nu\mu}^a)^2} \times \\ \times \text{tr } T \exp \left\{ ig \int_0^\beta d\tau A_0^a(\tau, \mathbf{x}) T_a \right\} \text{tr } T \exp \left\{ ig \int_0^\beta d\tau A_0^a(\tau, \mathbf{x}') T_a \right\}^*. \quad (22) \end{aligned}$$

Itt v_q a kvarkállapot által betöltött térfogat ($v_q^{-1} = \delta(\mathbf{x}=0)$), tehát $1/v_q^2$ a rögzített spinű kvarkok állapotsűrűsége. A későbbiekben nem lesz szükség a két szabad kvark állapotösszegével kapcsolatos $v_q^{-2} e^{-2m\beta}$ faktorra, ezért ezt elhagyjuk. Ami marad, az

a gluontér véges idejű euklideszi hatásával súlyozott átlaga a $W(\mathbf{x})W^*(\mathbf{x}')$ mennyiségnek, ahol bevezettük a

$$W(\mathbf{x}) = \text{tr } T \exp \left\{ ig \int_0^\beta d\tau A_0^a(\tau, \mathbf{x}) T_a \right\}$$

jelölést. Ha megfigyeljük, hogy a W komplex konjugálása a T -szorzat és az exponensbeli integrál fordított irányban való elvégzésével ekvivalens, akkor láthatjuk, hogy $W(\mathbf{x})$ és $W^*(\mathbf{x}')$ két ellenkező irányú ún. Wilson-hurok [(12), amelyek hőmérsékleti irányban záródnak a β -ra való periodicitás miatt.

Ha közeledünk a 0 hőmérséklethez, $\beta \rightarrow \infty$, akkor a $W(\mathbf{x})$ és $W(\mathbf{x}')$ két ellenkező irányú párhuzamos egyenesen vett Wilson-integrállá válik, amelyet — minthogy a végtelen távoli vonalakon vett integrál nem ad járulékot — bezárhatunk egyetlen időirányban végtelen hosszú Wilson-hurokká. Tehát a nulla hőmérséklet bezáró fázisára vonatkozó Wilson-kritérium (a Wilson-hurok várható értéke arányos a területével) ekvivalens az e paragrafus elején adott, fizikailag plauzibilis kritériummal, ha abban elvégezzük a $T \rightarrow 0$ limeszt.

2. FEJEZET

Az aszimptotikusan szabad kvark-gluon gáz

A nulla hőmérsékletű és sűrűségű QCD-ben — mint tudjuk — aszimptotikus szabadság van. Ez két dolgot jelent.

A. Bebizonyították, hogy a vertex függvény euklideszi impulzusoknál felvett értékével definiált csatolási állandó nullához tart, ha az impulzus végtelen nagygyá válik. (Feltéve, hogy a kvarkok száma nem túl nagy.) [13]

B. Kísérleti tapasztalat szerint bizonyos fizikai mennyiségek (pl. mélyen rugalmatlan struktúra-függvények) olyan skálatulajdonságot mutatnak, amely az A. pont ismeretében — ezen fizikai mennyiségek perturbációs sorának létezését feltételezve — ezen mennyiségekre levezethetők.

A B. pont, ha nem is implikálja, de valószínűvé teszi, hogy az itt említett mennyiségeknek valóban létezik egy értelmes perturbációs kifejtése legalábbis abban az impulzus tartományban, ahol a Bjorken-scaling, illetve az ehhez jövő logaritmikus korrekciók megfigyelhetők voltak. Különben az A. és B. állítások együttes fennállását véletlennek kiáltjuk ki. Innen már közvetlenül adódik az a kép, hogy valahányszor egy renormálási eljárást választunk, s a megfelelő perturbációs sorral definiáljuk elméletünket, mindannyiszor korlátozzuk is az elmélet hatáskörét azokra a fizikai mennyiségekre, amelyeknek létezik perturbációs soruk az illető sémában. Ha ebben a sémában aszimptotikus szabadságot találunk, akkor ez természetesen csak azon mennyiségek aszimptotikus viselkedésének kiszámítását teszi lehetővé, amelyek a fent említett módon beletartoznak ebbe a leszűkített elméletbe.

Három példával szeretném megvilágítani, hogy mit értek leszűkített elméleten.

1. Regularizáljuk valahogy a QCD-t (gondolhatunk rács-QCD-re) és számoljunk ki egy fizikai mennyiséget a levágással összemérhető skálán a perturbációs számítás legalacsonyabb nem triviális rendjében. Az eredmény egységnyi nagyságrendű szám lesz. Ha még a csupasz csatolási állandó is kicsi, joggal mondhatjuk, hogy

nem érdemes magasabb rendben számolni, mert azok már nem adnak számottevő járulékot. Számítsuk ki azonban ugyanezt a fizikai mennyiséget a perturbációs számítás legalacsonyabb nem triviális rendjében, makroszkopikus, tehát a levágási hosszánál sokkal nagyobb skálán. Az eredmény ismert módon a levágás szerint divergál (ultraibolya divergencia). A makroszkopikus skálájú fizikai mennyiség tehát nem tartozik a csupasz elmélet — mint leszűkített elmélet — hatáskörébe, abban nem számolható. A makroszkopikus skálájú mennyiségeket más sémában kell meghatározni: a renormált csatolási állandó szerint kell kifejtteni.

2. Ez a példa az elsőnek az átfogalmazása véges renormálás esetére. Legyen g_Q az off-shell kvark-gluon szórásban Q impulzusnál rögzített csatolási állandó. Triviálisan ez a séma a kvark-gluon szórást Q impulzusnál egzaktul leírja. Ha P impulzusnál kérdezzük ezt a mennyiséget és P közel van Q -hoz, akkor várhatóan elég lesz az első korrekciót kiszámítani a fagráfhoz és jó közelítést kapunk. Minél messzebb megyünk a P -vel a Q -tól, annál magasabb rendig kell számolni, és előfordulhat, hogy bizonyos P után („konvergenciasugár”) már értelmetlenné válik a g_Q szerinti kifejtés, át kell térni a g_P szerintire.

3. Ezzel a példával azt szeretném érzékeltetni, hogy a különböző renormálási eljárások valóban különböző fizikai mennyiségeket választanak ki. A 2. példában használt séma nyilván kiválóan alkalmas a lokális kvark-gluon vertex függvény számításánál, de teljesen használhatatlan a nem lokális Wilson-hurok kiszámítására. A Wilson-hurok tehát „nem-perturbatív”, természetesen hozzá kell tennünk, hogy a használt séma szempontjából. Ugyanakkor a Wilson-hurok perturbatív számolható rácson, $1/g$ szerinti kifejtésben. Itt viszont a kvark-gluon vertex kiszámítása okozna nehézséget.

A renorm csoport szerepe éppen az, hogy bizonyos leszűkített elméletek között kapcsolatot teremtsen, és integrálja őket egy kvázi-elméletté. Vegyük a Q paramétertől függő levonási sémák rendszerét. Ha Q^* az a pont, ahol a futó csatolási állandó eltűnik, akkor Q^* tetszőleges környezete egy kvázi-elméletet definiál, amelynek megkérdézhető fizikai mennyiségei a következők. Ha az $F(Q)$ Q skálán mért mennyiség a Q -hoz tartozó leszűkített elméletbe tartozik, akkor $F(Q')$ akkor jól definiált eleme a kvázi-elméletnek, ha a Q -ból Q^* -ba haladó renormcsoport pálya áthalad Q' -n.

Térjünk rá a véges hőmérsékletű és sűrűségű QCD-re. A vákuumról fent elmondottak megismételhetők itt is. Csupán azt kell meggondolnunk, hogy a hőmérséklet és a kémiai potenciál ugyanúgy a QCD-nek feltett kérdésekben szereplő paraméter, mint a Green-függvényekben szereplő impulzus, és nem a QCD saját, belső paramétere, mint az erős csatolási állandó, vagy a kvarktömeg. Természetesen ezen új paraméterek megjelenése új levonási eljárásokat, a médiumbeli levonásokat engedi meg. A perturbációs számítás segítségével néhány ilyen sémában megmutatható, hogy a futó csatolási állandó 0-hoz tart, ha vagy a T vagy a μ végtelenhez tart. A továbbiakban az aszimptotikus szabadság kifejezést a végtelen hőmérsékletű vagy sűrűségű esetre, ebben a szűkebb értelemben fogjuk használni, hiszen arra nem vállalkozhatunk, hogy meghatározzuk azon fizikai mennyiségek halmazát, amelyek az adott renormálási eljárásban és a $T \rightarrow \infty$ vagy $\mu \rightarrow \infty$ limeszben perturbációs sorral értelmezhetők.

2.1. Gráfszabályok

Az állapotösszeg (18) kifejezése közvetlenül még nem alkalmas a g szerinti perturbációs kifejtésre, mert a hatásnak a gluontérben kvadratikusan tagjában az integráloperátor nem invertálható, vagyis nem létezik a szabad gluon-propagátor. Ez a nehézség az ún. Fadeev—Popov-trükkal szüntethető meg [14].

Legyen $F(A)$ egy, értékeit a lokális mértékcsoport Lie-algebráján felvevő nem mértékinvariáns funkcionál, f pedig tetszőleges elem ebből a Lie-algebrából. Akkor az

$$1 = M_f(A) \int D\Omega \delta(F(A^\Omega) - f) \quad (24)$$

azonosságot (amely $M_f(A)$ definíciója) beírva a (18) funkcionálintegrálba és figyelembe véve $M_f(A)$ mértékinvarianciáját, kapjuk

$$Y = \mathcal{N}(\beta) \int DAD\bar{\psi}D\psi M_f(A) \delta(F(A) - f) e^{-\int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\tau, \mathbf{x})} \int D\Omega \quad (25)$$

(24)-ből következik, hogy $M_f(A) = \det \frac{\delta}{\delta \Omega} F(A^\Omega)|_{\Omega = \Omega_f(A)}$ ahol $\Omega_f(A)$ a létező és egyetlen megoldása (eltekintünk a Gribov-problémától [15]) az $F(A^\Omega) = f$ egyenletnek.

Speciálisan $M_{F(A)}(A) \equiv M(A) = \det \frac{\delta}{\delta \Omega} F(A^\Omega)|_{\Omega=1}$.

Mint ahogy (25) nem függ f -től, ezért nem változik, ha kiintegráljuk az

$$\frac{1}{K(\alpha)} \exp \left\{ -\frac{1}{2\alpha} \int_0^\beta d\tau \int d^3x [f^a(\tau, \mathbf{x})]^2 \right\}$$

súlyfüggvénnyel, ahol

$$K(\alpha) = \int Df \exp \left\{ -\frac{1}{2\alpha} \int_0^\beta d\tau \int d^3x [f^a(\tau, \mathbf{x})]^2 \right\}.$$

Elhagyva az érdektelen $\int D\Omega$ faktort:

$$Y = \frac{\mathcal{N}(\beta)}{K(\alpha)} \int DAD\bar{\psi}D\psi M(A) \exp \left\{ -\int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\mathcal{L}_E(\tau, \mathbf{x}) + \frac{1}{2\alpha} (F^a(\tau, \mathbf{x}|A))^2 \right] \right\}.$$

Az $M(A)$ determinánst előállíthatjuk egy $\bar{C} \left[\frac{\delta}{\delta \Omega} F(A^\Omega)|_{\Omega=1} \right] C$ hatású C komplex Grassman-térre, a „szellemtérre” vonatkozó funkcionálintegrál alakjában. Mivel a (25) alak levezetésében felhasználtuk, hogy az $S_E = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E$ hatás invariáns azokra az Ω transzformációkra, amelyek (24)-ben szerepelnek, ezért (24)-ben csak az időben β -ra periodikus mértéktranszformációkra integrálhatunk. Ekkor viszont a $\frac{\delta F}{\delta \Omega}(A^\Omega)$ integráloperátor szintén a periodikus Lie-algebra értékű függvényekre megszorítva értendő. Ezért az $M(A)$ determinánst előállító funkcionálintegrálban is csak a β -ra periodikus C komplex Grassman-terekre szabad integrálni.

Legyen $F^a(\tau, \mathbf{x}|A) = \partial_\mu A_\mu^a(\tau, \mathbf{x})$, ekkor kapjuk az ún. Fermi-típusú mértékeket. Ebben a mértékben Y -t az

$$Y = \frac{\mathcal{N}(\beta)}{K(\alpha)} \int DAD\bar{\psi}D\psi D\bar{C}DC \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \bar{\mathcal{L}}(\tau, \mathbf{x}) \right\} \quad (26)$$

integrál állítja elő, ahol az effektív Lagrange-függvény:

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}} = & \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A_\mu^a)^2 - \partial_\mu \bar{C}^a D_\mu^{ab}(A) C^b + \\ & + \bar{\psi}^\alpha [i\gamma_\mu^E \nabla_\mu^{\alpha\beta}(A) + m\delta^{\alpha\beta} - i\mu\gamma_0^E \delta^{\alpha\beta}] \psi^\beta. \end{aligned} \quad (27)$$

Az ebből kapható gráfszabályok megegyeznek a vákuumbeli QCD euklideszi gráfszabályaival két különbségtől eltekintve. Az egyik a β hosszúságú véges euklideszi idő következménye. Mindenütt az impulzusok energiakomponense diszkrét: a gluonra és a „szellemre” $p_0 = \omega_n \equiv \frac{2\pi}{\beta} n$ a kvarkra $p_0 = v_n = \frac{\pi}{\beta} (2n+1)$ (n egész). Például a gluon propagátor:

$$A_{\mu\nu}^{ab}(p) = \delta^{ab} \left[\frac{1}{p^2} \left(\delta_{\mu\nu} - (1-\alpha) \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \right) \right]_{p_0=\omega_n} \quad (28)$$

a szellem propagátor:

$$G^{ab}(p) = \delta^{ab} \frac{1}{\omega_n^2 + \mathbf{p}^2}.$$

Az $\int dp_0$ helyébe a gráfokban $\frac{2\pi}{\beta} \sum_n$ kerül, a $\delta(p_0)$ pedig $\frac{\beta}{2\pi} \delta_{n0}$.

A másik különbség a vákuumbeli gráfszabályokhoz viszonyítva, hogy a véges barionsűrűség miatt a kvark propagátorban megjelenik a kémiai potenciál, mint imaginárius energia:

$$S(p) = \frac{m - \gamma_\mu^E p_\mu}{m^2 + p^2} \Big|_{p_0=v_n - i\mu}. \quad (29)$$

A Coulomb-mérték gráfszabályaihoz úgy jutunk, hogy $F(A)$ -t $\partial_i A_i$ -nak választjuk. Ekkor

$$Y = \mathcal{N}(\beta) \int DAD\bar{\psi}D\psi D\bar{C}DC \delta(\partial_i A_i) \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3\mathbf{x} \bar{\mathcal{L}}_c(\tau, \mathbf{x}) \right\} \quad (30)$$

ahol

$$\bar{\mathcal{L}}_c = \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a - \partial_i \bar{C}^a D_i^{ab}(A) C^b + \bar{\psi}^\alpha [i\gamma_\mu^E \nabla_\mu^{\alpha\beta}(A) + m\delta^{\alpha\beta} - i\mu\gamma_0^E \delta^{\alpha\beta}] \psi^\beta \quad (31)$$

és C ugyanaz, mint előbb. A Dirac-delta eliminálására szolgáló α -s trükköt most elhagytuk, mert a gluon propagátor így is könnyen meghatározható:

$$A_{00}^{ab} = \frac{\delta^{ab}}{\mathbf{p}^2} \quad A_{0i}^{ab} = 0 \quad A_{ij}^{ab} = \frac{\delta^{ab}}{\omega_n^2 + \mathbf{p}^2} \left(\delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{\mathbf{p}^2} \right). \quad (32)$$

A szabad gluon propagátor tehát szétesik egy pillanatnyi (mert p_0 független) Δ_{00} Coulomb-tér és egy Δ_{ij} transzverzális gluon propagálására. A (31) Lagrange-függvényben érdemes megfigyelni, hogy a C szellemtér csak a transzverzális gluonokhoz csatolódik, a Coulomb-gluonhoz nem. A szellem és kvark propagátorok ugyanazok, mint az előbb.

2.2. Renormálás

A fenti gráfszabályokból képezett perturbációs sor ultraibolya divergenciákat tartalmaz, akárcsak a $T \rightarrow 0$, $\mu \rightarrow 0$ limesze, a vákuum. Ezek a divergenciák azonban nem súlyosabbak, mint a vákuuméi. Ha ugyanazokat a kontratagokat vezetjük be, mint a vákuumban, akkor a perturbációs sor tagjai végessé válnak. Ezt az állítást fizikailag plauzibilissé lehet tenni és az eddig kiszámolt g^2 -es, illetve $T=0$ esetén g^4 -es rendek tapasztalatai [16, 17, 18] is támogatják. Szigorú matematikai bizonyítás azonban nem ismeretes az irodalomban, annak ellenére, hogy egy korai munkájukban Kislinger és Morley adtak már egy vázlatos bizonyítást [1].

Soroljunk fel néhány érvet arra, miért gondoljuk, hogy ez az állítás igaz. I. Egy kvantumtérelmélet ultraibolya divergenciáit a rendszer egymáshoz nagyon közeli részeinek kölcsönhatása határozza meg. Az ultraibolya divergenciák tehát nem érzik a hő- és részecskék közli tartályt, azaz függetlenek a hőmérséklettől és a sűrűségtől. II. Ha az állapotösszeg funkcionálintegrál előállítására gondolunk, látjuk, hogy az inverz hőmérséklet a β , mint egy 4-dimenziós klasszikus statisztikus rendszer mérete jelenik meg, akárcsak az eredeti rendszer V 3-dimenziós térfogata. Márpedig tudjuk, hogy az ultraibolya divergenciák nem függenek a térfogattól. III. A részecskék közli tartály hatása mindössze abban nyilvánul meg, hogy a kvark propagátorokban a kvarkenergiát a valós tengelyről kitolja a komplex energiasíkra. Ez pedig arra utal, hogy egy mennyiség médiumbeli és vákuumbeli értéke közötti különbség pólus-tagok összege, ami effektíve egy 3-dimenziós elméletnek felel meg, ami kevésbé divergens, valószínűleg véges.

A véges hőmérsékletű és sűrűségű térelmélet vákuumbeli kontratagokkal való renormálhatósága a következőt jelenti: Vegyünk a vákuumban egy regularizálási eljárást. Ehhez tartozik egy csupasz csatolási állandó és különböző Z -faktorok, valamint kvarktömeg kontratag. Képzeld el, hogy ezt a regularizálási eljárást valahogy kiterjesztjük a $T \neq 0$, $\mu \neq 0$ esetre. A kontratagok is ennek megfelelően megváltoznak: az energia bennük diszkrété válik, a hullámfüggvény renormálási kontratagban megjelenik a kémiai potenciál, és vertex-kontratagokba az energia Dirac-delta helyett Kronecker-delta kerül. A Z -faktorok azonban változatlanok.

Tehát a Z renormálási állandók vehetők a vákuumból, s így természetesen kémiai potenciál és hőmérséklet-függetlenek lehetnek. Ez azonban nem jelenti azt, hogy egy véges renormálási transzformációval ne térhetnénk át egy olyan sémára, ahol a Z -faktorok és a tömeg kontratag függenek a hőmérséklettől és a kémiai potenciáltól. Egy ilyen sémában természetesen a renormált töltés, a tömeg és a renormált terek is T - és μ -függők, hiszen a csupasz mennyiségek T és μ -függetlenek azon egyszerű fizikai oknál fogva, hogy ők már akkor is léteztek, amikor a rendszerünket még nem tettük a hő- és részecskék közli tartályba.

Az olyan levonási eljárásokat, amelyek T és μ -függővé teszik a renormált mennyiségeket, médiumbeli rögzítésnek vagy levonásnak fogjuk nevezni, szemben a

vákuumbeli rögzítéssel, amikor a vákuumban definiált renormált mennyiségek segítségével adjuk meg a $T \neq 0$, $\mu \neq 0$ Green-függvényeket. Fel fogjuk tételezni, hogy minden a vákuumban működő regularizálás kiterjeszthető $T \neq 0$, $\mu \neq 0$ esetén is működő regularizálássá. (Egy hurok szinten látni fogjuk 2.4. paragrafusban, hogy ez hogy működik, de felhívnam a figyelmet a több hurok szinten mutatkozó esetleges többértelműségekre [17].) Ily módon minden a vákuumban használt levonási eljárásnak lesz médiumbeli megfelelője, amit azonos névvel fogunk illetni.

Példák különböző levonási eljárásokra:

I. Vákuumbeli

a. Minimális levonás: Dimenziós regularizálás után a véges részeket a pólus tag elhagyásával definiáljuk.

b. Rögzítés az impulzustérben: Bizonyos Green-függvényeknek bizonyos impulzusok (szimmetrikus pont) esetén felvett értékét rögzítjük, de $T=0$ és $\mu=0$ mellett.

II. Médiumbeli

a. Rögzítés impulzustérben: Kovariáns mértékben kvarknélküli QCD-re részletezzük: Három divergencia van: a 2-pontfüggvény transzverzális része, a 3- és 4-pontfüggvénynek pedig a Lagrange-függvény vertexeivel azonos tenzorstruktúrájú része. A Ward-azonosság miatt elegendő az első kettőt rögzíteni. Az egyrészezske-irreducibilis 2- és 3-pontfüggvények szerkezete (Fermi-mértékekben):

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij}^{(2)ab}(p, p', T | g, \alpha | \varepsilon, s) &= -\delta_\beta(p+p') \delta^{ab} (p^2 \delta_{ij} - p_i p_j) \times \\ &\times \Gamma_{tr}(p, T | g, \alpha | \varepsilon, s) - \delta_\beta(p+p') \delta^{ab} p_i p_j \Gamma_{long}(p, T | g, \alpha | \varepsilon, s) \\ \Gamma_{ijk}^{(3)abc}(p_1, p_2, p_3, T | g, \alpha | \varepsilon, s) &= -\frac{is^{\varepsilon/2}}{(2\pi)^{d/2}} \delta_\beta(p_1+p_2+p_3) f^{abc} \times \\ &\times [\delta_{ij}(p_1-p_2)_k + \delta_{jk}(p_2-p_3)_i + \delta_{ki}(p_3-p_1)_j] G(p_1, p_2, p_3, T | g, \alpha | \varepsilon, s) + \\ &+ \{\text{egyéb tenzorstruktúrák}\} \end{aligned}$$

ahol $\delta_\beta(p) = \delta_\beta((\omega_n, \mathbf{p})) = (\beta/2\pi) \delta_{n0} \delta(p)$ a végeshőmérsékleti Dirac-delta, g és α a csupasz csatolási állandó illetve mértékparaméter, $\varepsilon = 4-d$ a dimenziós regularizálás „levágási” paramétere, s pedig az ebben szereplő tömegdimenziójú paraméter $A Z_A$ hullámfüggvény renormálási állandót és a Z_g csatolási állandót renormáló faktort a következőképpen rögzítjük:

$$\Gamma_{tr}(p, T | g, \alpha | \varepsilon, s) \Big|_{\substack{p_0=0 \\ \mathbf{p}^2=M_0^2 \\ T=T_0}} = Z_A^{-1}(M_0, T_0 | g, \alpha | \varepsilon, s) \quad (33)$$

$$G(p_1, p_2, p_3, T | g, \alpha | \varepsilon, s) \Big|_{\substack{p_{i0}=0 \\ \mathbf{p}_i^2=M_0^2 \\ T=T_0}} = Z_g^{-1}(M_0, T_0 | g, \alpha | \varepsilon, s) \frac{gs^{-\varepsilon/2}}{Z_A^{3/2}} \quad (34)$$

T_0 annak a hőtartálynak a hőmérséklete, ahol a renormált mennyiségeket rögzítjük. Ezekből a renormált csatolási állandó már adott:

$$g_r = \hat{g}_r(M_0, T_0 | g, \alpha | \varepsilon, s) = Z_g^{-1}(M_0, T_0 | g, \alpha | \varepsilon, s) gs^{-\varepsilon/2}.$$

Konvenció: A renormált mennyiségek dimenziója a 4-dimenziós elméletből a renormálatlanoké a $d=4-\varepsilon$ dimenziósból veendő. (A Z -faktorok dimenziótlanok.)

b. Rögzítés a Coulomb-törvénnyel: Csak a csatolási állandót fogjuk rögzíteni, mert erre lesz szükségünk, de bárki kiegészítheti valamilyen Z_A -ra vonatkozó feltétellel egy teljes renormálási eljárássá.

Vákuumban, Coulomb-mértékben van egy Ward-azonosság [19], amely szerint a kvark-Coulomb-gluon csatolás Z_1 , és a kvark hullámfüggvény Z_ψ renormálási állandójának Z_1/Z_ψ hányadosa ultraibolya véges és tömeg független. Ezért a Coulomb-tér Z_c renormálási állandója és Z_g^2 szorzata is véges. A médiumban is ezért véges lesz a következő módon definiált g_r :

$$g^2 D_{00}(p, T, \mu | g | \varepsilon, s) \Big|_{\substack{p_0=0 \\ p^2=M_0^2 \\ T=T_0 \\ \mu=\mu_0}} = g_r^2 \frac{1}{p^2} \Big|_{p^2=M_0^2}. \quad (35)$$

Minthogy sztatikus kvark limeszben a kvark-gluon vertexkorrekciók eltűnnek [19], ezért $g^2 D_{00}$ éppen a sztatikus kvarkok energiáját méri. $g_r = \hat{g}_r(M_0, T_0, \mu_0 | g | \varepsilon, s)$ fizikai jelentése szerint tehát az a töltés, amelyet két végtelen tömegű kvark között T_0, μ_0 paraméterekkel jellemzett médiumban, sztatikusan ($p_0=0$), $1/M_0$ távolságon, Coulomb-törvényt illesztve mérünk.

2.3. Renormcsoport

A véges renormálási transzformációk, amelyek a renormálatlan (=csupasza) mennyiségeket (Green-függvények, csatolási állandók, tömegek) változtatlanul hagyják, csoportot alkotnak. (Ennek a végtelen dimenziós renormálási csoportnak a gyakorlatban csak bizonyos egyparaméteres részcsoportjait szokták vizsgálni.) Azok a transzformációk, amelyek nem vezetnek ki a vákuumbeli levonási sémák köréből, alkotják a szokásos vákuumbeli renormálási transzformációk kiterjesztését médium esetén. Erre példaként be fogjuk mutatni az impulzustérbeli levonásokat összekötő renormcsoport működését médium jelenlétében. További példáink olyan kétparaméteres alcsoportok lesznek, amelyek nincsenek benne a vákuumbeli renormálási transzformációk alcsoportjában, mert különböző hőmérsékletű hőtartályokban definiált levonási eljárásokat kötnek össze.

Mindhárom példánkban azt találjuk, hogy a QCD aszimptotikusan szabad, azaz a futó csatolási állandó a levonási paraméterek (a T_0, μ_0, M_0) végtelenhez tartásával nullához tart. Ez teszi lehetővé bizonyos Green-függvények ultraibolya aszimptotikájának ($p, T, \mu \rightarrow \infty$) a kiszámítását a perturbációs számítás legalacsonyabb nem triviális rendjét felhasználva.

1. Renormcsoport impulzustérbeli levonásban.

Ebben a sémában a renormcsoport egyenlet azon alapul [13], hogy a renormálatlan Green-függvények nem függenek az M_0 tömegparamétertől, amely azt a pontot jellemzi, ahol a renormált g , csatolási állandót, a renormált m_r kvarktömeget és a Z -faktorokat rögzítettük. Minthogy a séma definíciója szerint a rendszert hőtartályba helyezve g , és m_r definíciója, és a Z -k sem változnak, ezért a renormált Γ_r , egyrészecske-irreducibilis Green-függvény ugyanazt a renormcsoport egyenletet elégíti ki, mint

a vákuumban, ugyanazzal a β , γ és γ_m függvényekkel: (Landau-mértékben: $\alpha=0$)

$$\left[M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} + \beta(g_r) \frac{\partial}{\partial g_r} + m_r \gamma_m(g_r) \frac{\partial}{\partial m_r} - \gamma_r(g_r) \right] \Gamma_r(p, T, \mu | g_r, m_r | M_0) = 0 \quad (36)$$

γ_r a Γ_r anomális dimenziója, amely Γ_r különböző külső lábaihoz tartozó γ anomális dimenziókból tevődik össze. β és γ_m definíciója a szokásos [20]. Ha Γ_r kanonikus dimenziója d_r , akkor Γ_r homogén d_r -adrendűségét kifejező Euler-egyenlet:

$$\left(M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} + p \frac{\partial}{\partial p} + T \frac{\partial}{\partial T} + \mu \frac{\partial}{\partial \mu} + m_r \frac{\partial}{\partial m_r} - d_r \right) \Gamma_r(p, T, \mu | g_r, m_r | M_0) = 0.$$

A két egyenletet kivonva egymásból:

$$\left\{ p \frac{\partial}{\partial p} + T \frac{\partial}{\partial T} + \mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \beta(g_r) \frac{\partial}{\partial g_r} + m_r [1 - \gamma_m(g_r)] \frac{\partial}{\partial m_r} - d_r + \gamma_r(g_r) \right\} \times \\ \times \Gamma_r(p, T, \mu | g_r, m_r | M_0) = 0.$$

Ez az egyenlet ekvivalens a

$$\frac{d}{dt} \left\{ \Gamma_r(e^{-t} p, e^{-t} T, e^{-t} \mu | \bar{g}(t), e^{-t} \bar{m}(t) | M_0) \exp \left[\int_0^t dt' (d_r - \gamma_r(\bar{g}(t'))) \right] \right\} = 0$$

egyenlettel, ahol a \bar{g} futó csatolási állandó és az \bar{m} futó kvarktömeg definíciója:

$$\frac{d}{dt} \bar{g}(t) = \beta(\bar{g}(t)) \quad \bar{g}(0) = g_r$$

$$\frac{d}{dt} \bar{m}(t) = \gamma_m(\bar{g}(t)) \bar{m}(t) \quad \bar{m}(0) = m_r.$$

A β -függvény g^3 -rendű tagjából a futó csatolási állandó:

$$\bar{g}^2(t) = \frac{g_r^2}{1 + 2\beta_0 g_r^2 t} \quad \beta_0 = \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{11}{3} N_c - \frac{2}{3} N_f \right)$$

nullához tart, ha $t \rightarrow \infty$ (N_f , a flavorszám kicsi). Γ_r aszimptotikus viselkedése az ultraibolya tartományban:

$$\Gamma_r(e^t p, e^t T, e^t \mu | g_r, m_r | M_0) = \exp \left\{ \int_0^t dt' [d_r - \gamma_r(\bar{g}(t'))] \right\} \times$$

$$\times \Gamma_r(p, T, \mu | \bar{g}(t), e^{-t} \bar{m}(t) | M_0) \approx \text{const } e^{t d_r} t^{-\gamma_r^0/2\beta_0} \Gamma_r(p, T, \mu | 0, 0 | M_0). \quad (37)$$

Az utóbbi közelítő egyenlőség akkor áll fenn, ha g_r és m_r elég kicsi (azaz M_0 elég nagy) ahhoz, hogy a $[0, t]$ intervallum teljes egészében az aszimptotikus tartományban legyen. $\gamma_r(g)$ pedig legalacsonyabb rendben $\gamma_r^0 \cdot g^2$.

2. Renormcsoport a médiumban végzett impulzustérbeli levonásra.

Ezt a sémát részletesen ismertettük az előző paragrafus II/a. pontjában. Kvar-k nélküli QCD-t vizsgálunk. A levonási sémának két paramétere van: T_0 , M_0 . A renormcsoport egyenlet azt fejezi ki, hogy a renormálatlan Green-függvények függetlenek T_0 -tól és M_0 -tól. Az n -lábú renormált $\Gamma_r^{(n)}$ $1-Pi$ Green-függvényre tehát:

$$\left(M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} + \beta_M \frac{\partial}{\partial g_r} + \delta_M \frac{\partial}{\partial \alpha_r} - n\gamma_M \right) \Gamma_r^{(n)}(p, T|g_r, \alpha_r|M_0, T_0) = 0$$

$$\left(T_0 \frac{\partial}{\partial T_0} + \beta_T \frac{\partial}{\partial g_r} + \delta_T \frac{\partial}{\partial \alpha_r} - n\gamma_T \right) \Gamma_r^{(n)}(p, T|g_r, \alpha_r|M_0, T_0) = 0,$$

ahol

$$\beta_M = M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} g_r \quad \beta_T = T_0 \frac{\partial}{\partial T_0} g_r$$

$$\gamma_M = \frac{1}{2} M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} \ln Z_A \quad \gamma_T = \frac{1}{2} T_0 \frac{\partial}{\partial T_0} \ln Z_A$$

$$\delta_M = -2\alpha_r \gamma_M \quad \delta_T = -2\alpha_r \gamma_T.$$

Itt a deriválások konstans g , α , ε , s mellett végzendők el, majd az eredményt ki kell fejezni M_0 , T_0 , g_r , α_r segítségével. Az 1. renormcsoport egyenlet levezetésénél használt módszer, a levonási paraméter kiküszöbölése, többparaméteres levonási eljárásoknál nem alkalmazható, mivel a dimenziót rögzítő Euler-egyenletből mindig egy van. Viszont könnyen ellenőrizhető, hogy (38) ekvivalens azzal, hogy

$$\Gamma_r^{(n)}(p, T|\bar{g}(M_0, T_0), \bar{\alpha}(M_0, T_0)|M_0, T_0) \times$$

$$\times \exp \left\{ -n \int^{(M_0, T_0)} \left[\frac{dM'_0}{M'_0} \gamma_M(M'_0, T'_0|\bar{g}(M'_0, T'_0), \bar{\alpha}(M'_0, T'_0)) + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{dT'_0}{T'_0} \gamma_T(M'_0, T'_0|\bar{g}(M'_0, T'_0), \bar{\alpha}(M'_0, T'_0)) \right] \right\}$$

nem függ M_0 -tól és T_0 -tól. A \bar{g} , $\bar{\alpha}$ futó paraméterek kielégítik a

$$M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} \bar{g}(M_0, T_0) = \beta_M(M_0, T_0|\bar{g}(M_0, T_0), \bar{\alpha}(M_0, T_0))$$

$$T_0 \frac{\partial}{\partial T_0} \bar{g}(M_0, T_0) = \beta_T(M_0, T_0|\bar{g}(M_0, T_0), \bar{\alpha}(M_0, T_0))$$

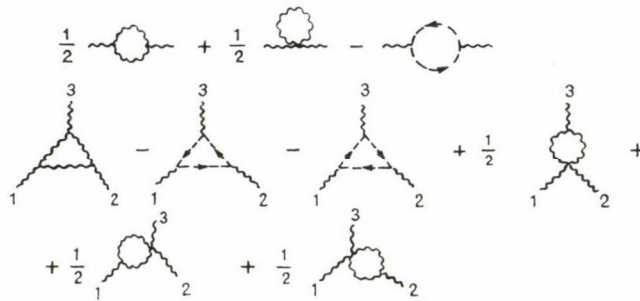
$$M_0 \frac{\partial}{\partial M_0} \bar{\alpha}(M_0, T_0) = \delta_M(M_0, T_0|\bar{g}(M_0, T_0), \bar{\alpha}(M_0, T_0))$$

$$T_0 \frac{\partial}{\partial T_0} \bar{\alpha}(M_0, T_0) = \delta_T(M_0, T_0|\bar{g}(M_0, T_0), \bar{\alpha}(M_0, T_0))$$

csatolt parciális differenciálegyenlet-rendszert. Mivel kétszer annyi egyenletünk van, mint ismeretlen függvényünk, ezért ha az (M_0, T_0) sík egy pontjában megadjuk a

\bar{g} és $\bar{\alpha}$ értékét, akkor ez az egyenlet meghatározza őket a sík egy tartományában is. A tartomány nagysága a β és γ függvényektől függ. QCD-ben ez a tartomány az $M_0 > 0, T_0 > 0$, azonban gyakorlatilag csak a nagy M_0 vagy nagy T_0 tartományban tudjuk kiszámítani a futó paramétereket, mivel a β és γ függvények csak a perturbációszámításból, tehát kis \bar{g} -ra számolhatók. Ha tehát (40)-be a perturbatív β és δ függvényeket írjuk, akkor a fentiekhez még a $\bar{g} \ll 1$ feltételt is hozzá kell venni, ami korlátozza a tartományt. \bar{g} és $\bar{\alpha}$ nagy M_0 , és nagy T_0 -beli viselkedéséből (39) felhasználásával $\Gamma_r^{(n)}$ nagy M_0 -beli vagy nagy T_0 -beli aszimptotikus viselkedése már meghatározható.

Számítsuk ki a β_M és β_T függvényeket kvarknélküli QCD-ben! A számolást Feynman-mértékben ($\alpha=1$), dimenziós regularizálással egy-hurok kötésben végeztük el. Szükség volt a 2- és 3-pont függvények meghatározására (lásd az 1. ábrát!) a (33),



1. ábra. A $\Gamma^{(2)}$ -ben és $\Gamma^{(3)}$ -ban szereplő 1-hurok gráfok

(34)-ben definiált levonási pontban. A véges hőmérséklet okozta korrekciókat először $T_0 \ll M_0$ határesetben adjuk meg. (33) és (34) segítségével a Z_A, Z_g renormálási állandók:

$$Z_A(M_0, T_0 | g, \alpha = 1 | \varepsilon, s) = 1 + \frac{g^2 s^{-\varepsilon}}{16\pi^2} N_c \left(\frac{10}{3} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{5}{3} \ln \frac{M_0^2}{4\pi s^2} - \frac{5}{3} C + \frac{31}{9} + \frac{8\pi^2}{3} \frac{T_0^2}{M_0^2} \right) \quad (41)$$

$$Z_g(M_0, T_0 | g, \alpha = 1 | \varepsilon, s) = 1 + \frac{g^2 s^{-\varepsilon}}{16\pi^2} N_c \left(-\frac{11}{3} \frac{1}{\varepsilon} + \frac{11}{6} \ln \frac{M_0^2}{4\pi s^2} + \frac{11}{6} C - \frac{1}{36} I - \frac{23}{6} - \frac{7\pi^2}{3} \frac{T_0^2}{M_0^2} \right) \quad (42)$$

C az Euler-állandó, I pedig a [21]-ben meghatározott szám: $I = 2,3439072 \dots$ Z_g egyszerű deriválásából kapjuk a β -függvényeket:

$$\beta_M(M_0, T_0 | g_r, \alpha_r = 1) = -\frac{g_r^3}{16\pi^2} N_c \left[\frac{11}{3} + \frac{14\pi^2}{3} \frac{T_0^2}{M_0^2} + O\left(\frac{T_0^3}{M_0^3}\right) \right] + O(g_r^5) \quad (49)$$

$$\beta_T(M_0, T_0 | g_r, \alpha_r = 1) = \frac{g_r^3}{16\pi^2} N_c \left[\frac{14\pi^2}{3} \frac{T_0^2}{M_0^2} + O\left(\frac{T_0^3}{M_0^3}\right) \right] + O(g_r^5).$$

Nulla hőmérsékleten a β -függvény g_r^3 -ös tagja nem függ α -tól. Munkahipotézisként tegyük fel, hogy $T > 0$ esetén is ez a helyzet. Ekkor a (40) egyenletrendszer első két egyenlete szeparálódik és megoldható a (43) közelítő β -függvényekkel (lásd a II. Függelékét!) A megoldás

$$\bar{g}^2(M, T) = \frac{g_0^2}{1 + g_0^2 \left[\beta_0 \ln \frac{M^2}{M_0^2} - \beta'_0 \left(\frac{T^2}{M^2} - \frac{T_0^2}{M_0^2} \right) \right]}, \quad (44)$$

ahol $\beta_0 = \frac{11}{3} \frac{N_c}{16\pi^2}$ és $\beta'_0 = \frac{7}{8} N_c/3$. (44) érvényességi köre az $M_0 \gg T_0$, $M \gg T$, $\bar{g}^2(M, T) \ll 1$, $\bar{g}^2(M_0, T_0) \ll 1$ tartomány. Ebben a tartományban a hőmérséklet az aszimptotikus szabadság ellen dolgozik, amint ez (44)-ből leolvasható. (44) megfelelőjét a $T_0 \gg M_0$ esetben nem adjuk meg külön, mert az eredmény ugyanaz, mint a Coulomb-sémában (lásd (48)-at!).

Tekintsünk most egy fizikai tömeget a tiszta gluonelméletben, amely tehát mértekinvariáns és így csak T -nek a levonási paramétereknek és a g_r -nek a függvénye: $\mathcal{M} = \mathcal{M}(T, g_r, M_0, T_0)$. Az \mathcal{M} fizikai tömeg renorminvariáns, tehát

$$\frac{d}{dM_0} \mathcal{M}(T, \bar{g}(M_0, T_0), M_0, T_0) = 0$$

$$\frac{d}{dT_0} \mathcal{M}(T, \bar{g}(M_0, T_0), M_0, T_0) = 0.$$

Ehhez a két egyenlethez dimenzióanalízist hozzátéve, a fizikai tömeg általános alakja meghatározható egy egyváltozós függvény erejéig (II. Függelék).

$$\mathcal{M} = \Lambda f(T/\Lambda), \quad (45)$$

ahol a Λ paraméter szintén renorminvariáns:

$$\Lambda = M_0 \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta_0} \left(\frac{1}{g_r^2} + \beta'_0 \frac{T_0^2}{M_0^2} \right) \right\}. \quad (46)$$

Ez a kifejezés $T_0 = 0$ esetben visszaadja a vákuum impulzustérbeli levonási eljárásban definiált Λ^{MOM} paramétert [21], a (46)-beli Λ tehát számértékileg megegyezik a vákuum Λ^{MOM} paraméterével.

3. Futó csatolási állandó a Coulomb-sémában.

Ha kvarkjaink nincsenek, akkor ez a séma két levonási paramétert tartalmaz: M_0, T_0 . Ha a (42) által definiált renormált g_r csatolási állandót összehasonlítjuk a (44) futó csatolási állandóval, láthatjuk, hogy az utóbbi bizonyos végtelen sornak a felösszegzésével áll elő, amelynek első tagjai visszaadják a perturbatív g_r -t. A Coulomb levonási sémában az ennek megfelelő végtelen sort meg lehet fogalmazni a gráfok nyelvén is. Előlegezzük ezért a következő paragrafusból a polarizációs tenzor értékét Coulomb-mértékben

$$\Pi_{00}(k_0 = 0, |\mathbf{k}| \gg T) = -g_M^2 \beta_0 \mathbf{k}^2 \ln \frac{\mathbf{k}^2}{M^2} + g_M^2 \frac{N_c}{18} T^2.$$

két invariánstól függő felbontás adódik, ahol $\eta_\mu = (1, 0, 0, 0)$. $\Pi_{\mu\nu}$ -t g^2 rendben előállító gráfok a következők:

$$\Pi_{\mu\nu}^{ab}(k, k') = \delta_{\mu\nu}(k-k')\delta^{ab}\Pi_{\mu\nu}(k) \quad (49)$$

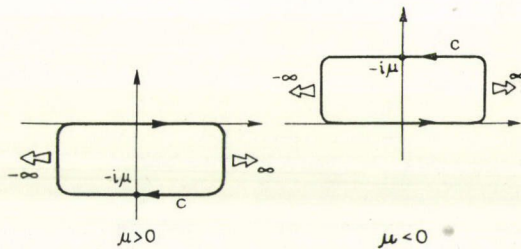
$$= \frac{1}{2} \text{ (diagram 1) } + \frac{1}{2} \text{ (diagram 2) } - \text{ (diagram 3) } - \text{ (diagram 4) }$$

Ezeknek az egyhurok gráfoknak a kiszámítását megkönnyíti a Sommerfeld—Watson-féle trükk, amellyel az energiasummát a komplex energiasíkon vett kontúrintegrálokra lehet visszavezetni.

$$\frac{2\pi}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) + \int_{-\infty-i\epsilon}^{-\infty+i\epsilon} d\omega \frac{f(\omega)}{e^{i\beta\omega}-1} + \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} d\omega \frac{f(\omega)}{e^{-i\beta\omega}-1} \quad (50)$$

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(v_n - i\mu) &= \int_{-\infty}^{\infty} dz f(z) + \int_C dz f(z) - \int_{-\infty-i\mu-i\epsilon}^{-\infty-i\mu+i\epsilon} dz \frac{f(z)}{e^{i\beta z - \beta\mu} + 1} - \\ &- \int_{-\infty-i\mu+i\epsilon}^{-\infty-i\mu-i\epsilon} dz \frac{f(z)}{e^{-i\beta z + \beta\mu} + 1}. \end{aligned} \quad (51)$$

A C görbét lásd a 3. ábrán!



3. ábra. A C -kontúr definíciója

Az (50), illetve (51) jobb oldalán álló első tag éppen az az energiaintegrál, amely a bal oldali energiaösszegnek $T=0$, $\mu=0$ esetén megfelel. Ez teszi lehetővé, hogy a polarizációs tenzor egy-hurok gráfjaiból egyszerűen leválasszuk a vákuum járulékat. A kontratagok járuléka is belecsapható a vákuum járulékába, mert (50) és (51) többi kontúrintegrálja nem okoz divergenciát. Tudniillik vagy tartalmaz egy Bose—Einstein, illetve Fermi—Dirac eloszlásfüggvényt, amely konvergenciát tesz a $\int d^3k$ integrálokat, vagy pedig egy zárt kontúrra vonatkozik, amely csak a Fermi-gömb belsejében levő impulzusok esetén vesz fel pólusjárulékat. Az eredmény csak egy bonyolult integrál formájában adható meg [16], ezért szorítkozzunk két sztatikus határ-

A hullámvonal itt csak a transzverzális gluont jelenti. Ha a hőmérséklet vagy a kémiai potenciál sokkal nagyobb, mint a \mathbf{k} impulzus, akkor $\Pi_{00}(k_0=0)$ -ra az (52) eredményt kapjuk. Ha viszont az impulzus nagy, akkor

$$\Pi_{00}(k_0 = 0, \mathbf{k}, T, \mu) = -g_M^2 \beta_0 \mathbf{k}^2 \ln \frac{\mathbf{k}^2}{M^2} + g_M^2 \frac{N_c}{18} T^2 \quad (54)$$

$$\beta_0 = \frac{1}{16\pi^2} \left(\frac{11}{3} N_c - \frac{2}{3} N_f \right)$$

g_M a vákuumban impulzustérbeli levonásban szereplő csatolási állandó.

2.5. A termodinamikai potenciál

A nem kölcsönható kvark-gluon rendszer nagykanonikus termodinamikai potenciálja (az egyszerűség kedvéért flavor-független μ -re írjuk fel):

$$I_0(T, V, \mu) = -\frac{1}{\beta} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{p} \{ \ln(1 - e^{-\beta|\mathbf{p}|})^{-2N_g} + \\ + \ln[1 + e^{-\beta(E(\mathbf{p}) - \mu)}]^{2N_c N_f} + \ln[1 + e^{-\beta(E(\mathbf{p}) + \mu)}]^{2N_c N_f} \}.$$

Ezt zérus kvarktömeg esetén egyszerű alakba írhatjuk:

$$I_0(T, V, \mu) = -V \left\{ N_g \frac{\pi^2}{45} T^4 + N_f N_c \left(\frac{7\pi^2}{90} T^4 + \frac{1}{6} T^2 \mu^2 + \frac{1}{12\pi^2} \mu^4 \right) \right\} \quad (55)$$

N_g a gluonok, N_c a kvark-színek, N_f pedig a kvarkfajták (flavor) száma.

A termodinamikai potenciál kölcsönhatási részét g^2 rendben a következő 2-hurok gráfok adják:

$$\frac{1}{12} \text{ (gluon loop) } + \frac{1}{8} \text{ (ghost loop) } - \frac{1}{2} \text{ (quark loop) } - \frac{1}{2} \text{ (antiquark loop) } \quad (56)$$

Ezekhez jönnek még a g^2 rendű kontratagok 1-hurok gráfjai:

$$\frac{1}{2} \text{ (gluon tad) } - \text{ (ghost tad) } - \text{ (quark tad) } \quad (57)$$

Az (57) gráfok azonban (56) gráfjaiban csak a részgráfok divergenciáit oltják ki, marad egy olyan primitív divergencia, amelyet csak egy új kontrataggal lehet végezzé tenni. Az új kontratag, \otimes , egy puszta szám, tereket nem tartalmaz. Ezzel tehát a Lagrange-függvényben egy additív konstanst is rögzítünk, ami a szokásos perturbációs számításban nem merül fel, mert ott csak külső lábakkal rendelkező Green-függvényekkel foglalkozunk.

Szükség van tehát egy újabb renormálási feltételre. Mondjuk, legyen a termodinamikai potenciál a vákuumban 0.

$$I(g|V, T, \mu)|_{T=\mu=0} = 0.$$

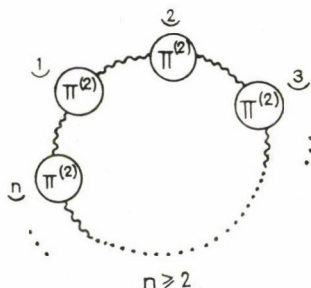
Ez a feltétel látszólag azt fejezi ki, hogy a nyomás a vákuumban zérus. Ebben a paragrafusban megmaradunk ennél a feltételnél, de 4.1. pontban visszatérünk erre és módosítani fogjuk.

Az I kölcsönhatási része tehát

$$I - I_0 = -V g^2 \left[-\frac{N_g}{48} T^4 - N_f N_c \left(\frac{5}{216} T^4 + \frac{1}{12\pi^2} T^2 \mu^2 + \frac{1}{24\pi^4} \mu^4 \right) \right]. \quad (58)$$

A kölcsönhatás bekapcsolásakor a kvark-gluon gázban csökken a nyomás, ami vonzó kölcsönhatásra vall. Aszimptotikusan nagy hőmérséklet és kémiai potenciál tartományokra is érvényes alakot kapunk, ha (58)-ban a csatolási állandó helyébe valamelyik futó csatolási állandót írjuk. Eredményül az adódik, hogy nagy hőmérsékleten vagy sűrűségen a QCD állapotegyenlete a szabad kvark-gluon gáz állapotegyenletéhez tart.

Az utóbbi időben azonban súlyos érvek merültek fel az irodalomban [6, 7], amelyek kétségbe vonják ezt a következtetést. Röviden szeretném ismertetni ezt a gondolatmenetet. A probléma forrása a térszerű gluonokkal kapcsolatos infravörös divergencia. Az időszzerű gluonok is okoznak infravörös divergenciát a $\Pi_{00} k=0$ -beli véges értéke miatt (ld. a 4. ábrát!). Ez azonban jól kezelhető, ha a perturbációs kifejtést a



4. ábra. Az elektromos tömeg miatt infravörösen divergens gráfok a termodinamikai potenciálban

másodrendű korrekciókat felösszegező gluon és szellem propagátorokkal végezzük. Nem ez a helyzet a térszerű gluonok okozta infravörös divergenciákkal, amelyek g^6 rendben jelennek meg először a termodinamikai potenciálban. Ezek a divergenciák is kúrálhatók, ha a g^4 rendű polarizációs tenzorban jelentkező mágneses tömeggel javítjuk a propagátorokat. Azonban míg az elektromos tömeg gT nagyságrendű volt, addig a mágneses tömeg $m_{\text{magn.}} \sim g^2 T$ és ezért bármely gráfhoz tetszőlegesen sok térszerű „feljavított” gluon propagátort tehetünk hozzá anélkül, hogy a gráf rendje megváltozna. Nem létezik tehát egy tagonként véges perturbációs sora a termodinamikai potenciálnak g szerint. Ezért nem is alkalmazható rá a renormcsoport gondolatmenete.

3. FEJEZET

Mértékelmélet rácson

A mértékelmélet Wilson-féle megfogalmazása [12] rácson úgyis tekinthető, mint a kontinuum mértékelméletnek egy mértékinvariáns regularizálása, amelyben az a rácsállandó a levágási hossz. Ezt az elvet követve a végeshőmérsékletű mértékelméletet úgy tehetjük rácsra, hogy a (18) funkcionálintegrálnak elkészítjük a rácsváltozatát „időirányban” periodikus rácson. Ezt a módszert, amit Lagrange-formalizmusnak fogunk nevezni, írjuk le a 3.1.-ben.

Kínálkozik azonban egy másik módszer is. A (18) funkcionálintegrál levezetésének alapjául szolgáló (12) Hamilton-operátort és a fizikai altérre vetítő (9) ope-

rátört közvetlenül kell rácsra tenni. Az így definiált rács-mértékelmélet állapotösszegére az 1.5. levezetés analógiájára szintén egy funkcionálintegrál reprezentáció adható, amely térirányokban rácsosított, időirányban folytonos. Ez a Hamilton-formalizmus (3.2.).

Ez a két módszer véges rácsállandónál biztosan különböző elméletet definiál. A várakozás az, hogy mindkét elmélet kontinuum limitben valamilyen csatolási állandójú kontinuum mértékelmélethez tart. Tehát kis rácsállandónál a Hamilton- és Lagrange-módra definiált rácselmélet csak a csupasz csatolási állandó számértékében különbözhet egymástól. (A kontinuum limeszről részletesebben a 4.5.-ben lesz szó.)

Rácson nagy csupasz csatolási állandó esetén tudunk perturbációs számítást csinálni. Ez az erős csatolási kifejtés azt mutatja, hogy a mértékelméletek bezáró fázisban vannak. Ugyanakkor Polyakov és Susskind nyomán [2, 3] tudjuk, hogy ebben az erős csatolású rendszerben nagy hőmérsékleten kvarkfelszabadulás van.

3.1. Rácsgeometria és a Lagrange-formalizmus

Vegyünk egy 4-dimenziós köbös rácsot a rácsállandóval, amely bármely irányát tekintve vagy végtelen vagy periodikus. A rácspontok halmazát jelölje \mathcal{R}^0 , az éleket \mathcal{R}^1 , a lapokét (plakettekét) \mathcal{R}^2 , az elemi kockákét \mathcal{R}^3 és a hiperkockákét \mathcal{R}^4 . Az \mathcal{R} rács úgy tekinthető, mint az $\{\mathcal{R}^0, \dots, \mathcal{R}^4\}$ bizonyos szomszédsági relációval ellátva (minden élhez tartozik két szomszédos rácspont, ... stb.). A szomszédsági reláció [23] segítségével a rácson homológiaelmélet építhető fel [24], amely nagyon kényelmes az ábeli mértékelméletek tárgyalásánál. Nem-ábeli mértékelméleteknél célszerűbb a rács differenciálgeometriai tulajdonságait hangsúlyozni. A következőkben ezt szeretnénk röviden vázolni.

Legyen V egy N_c dimenziós lineáris tér a komplex számtest fölött, ahol a belső csoport Ω ábrázolása működik. Jelöljük \mathcal{H}^0 -al a $\varphi: \mathcal{R}^0 \rightarrow V$ függvények halmazát. Defináljunk \mathcal{H}^0 -on skalárszorzatot:

$$\varphi, \eta \in \mathcal{H}^0 \rightarrow (\varphi, \eta) = \sum_{x \in \mathcal{R}^0} \varphi^+(x) \eta(x) \in \mathbb{C}.$$

A rácsnak $x \in \mathcal{R}^0$ pontjába állított $T_x(\mathcal{R})$ tangensstere egy 4-dimenziós valós lineáris tér, amely bizonyos \mathcal{H}^0 -on értelmezett lineáris funkcionálokból áll. Elegendő $T_x(\mathcal{R})$ -en egy bázist megadni: $\{\partial_\mu(x)\}_{\mu=0,1,2,3}$

$$\varphi \in \mathcal{H}^0 \rightarrow \partial_\mu(x) \varphi \in \mathbb{C} \quad \partial_\mu(x) \varphi =: \varphi(x + \hat{\mu}) - \varphi(x)$$

($\hat{\mu}$ a μ irányú, rácsállandóban mérve egységnyi vektor) $\partial_\mu(x)$ -nek van adjungáltja a $(,)$ skalárszorzat szerint, amely azonban nem $T_x(\mathcal{R})$ -nek, hanem $T_{x-\hat{\mu}}(\mathcal{R})$ -nek eleme.

$$\partial_\mu^+(x) \varphi = \varphi(x - \hat{\mu}) - \varphi(x).$$

Tehát

$$\partial_\mu^+(x) = -\partial_\mu(x - \hat{\mu}).$$

Ha ∂_μ -t írunk $\partial_\mu(x)$ helyett, akkor egyesítettük a különböző x pontokban levő vektorokat egy vektormezővé.

$$\partial_\mu: \mathcal{H}^0 \rightarrow \mathcal{H}^0$$

$$\partial_\mu \varphi(x) =: \partial_\mu(x) \varphi.$$

Hasonlóan definiáljuk a ∂_μ^+ vektormezőt is. A differenciálható sokaságokkal való analógia tovább vihető és definiálható a kotangens tér, a külső deriválás, differenciálformák ... stb. A rács lényegesen nem változtatja meg ezek algebrai struktúráját.

Ezekkel a fogalmakkal a skalár térelméletek már egyértelműen rácsra tehetők. A mértékelméletek rácsosításához még szükség van a konnekciónak fogalmára rácsra. Legyen $\Omega(G)$ a G színcsoportot V -n ábrázoló unitér mátrixcsoport. Akkor konnekciónak nevezünk minden $U: \mathcal{R}^1 \rightarrow \Omega(G)$ függvényt. U segítségével felírható a $\hat{\mu}$ -vel való párhuzamos eltolás \mathcal{H}^0 -on:

$$\varphi \in \mathcal{H}^0 \rightarrow P_\mu \varphi \in \mathcal{H}^0 \quad P_\mu \varphi(x) =: U_\mu(x - \hat{\mu}) \varphi(x - \hat{\mu}),$$

ahol $U_\mu(x)$ az x rácspontból $\hat{\mu}$ irányba induló élen értelmezett U konnekciónak adjungáltja a $-\mu$ -vel való párhuzamos eltolás, ami éppen P_μ inverze is:

$$P_\mu^{-1} \varphi(x) = P_\mu^+ \varphi(x) = U_\mu^+(x) \varphi(x + \hat{\mu}).$$

A kovariáns deriválást a szokásos módon P_μ segítségével definiáljuk.

$$\nabla_\mu: \mathcal{H}^0 \rightarrow \mathcal{H}^0 \quad \nabla_\mu =: P_\mu^+ - 1$$

$$\nabla_\mu \varphi(x) = U_\mu^+(x) \varphi(x + \hat{\mu}) - \varphi(x)$$

∇_μ adjungáltja $\nabla_\mu^+ = P_\mu - 1$, $\nabla_\mu^+ \varphi(x) = U_\mu(x - \hat{\mu}) \varphi(x - \hat{\mu}) - \varphi(x)$.

Könnyen igazolható a

$$\nabla_\mu^+ \nabla_\mu + \nabla_\mu^+ + \nabla_\mu = 0 \quad (59)$$

azonosság.

A görbületi tenzor kétféleképpen általánosítható: globálisan, egy lap élei mentén való $P_\nu^+ P_\mu^+ P_\nu P_\mu$ párhuzamos eltolással, vagy „differenciálisan” (4) analógiájára, a kovariáns deriváltak kommutátoraként. Kiderül, hogy a kettő között egyszerű kapcsolat van.

$$P_\nu^+ P_\mu^+ P_\nu P_\mu + (P_\nu^+ P_\mu^+ P_\nu P_\mu)^+ = 2 - [\nabla_\mu, \nabla_\nu][\nabla_\mu, \nabla_\nu]^+. \quad (60)$$

Legyen $F_{\mu\nu} = \frac{i}{g} [\nabla_\mu, \nabla_\nu]$

$$\varphi \in \mathcal{H}^0 \rightarrow F_{\mu\nu} \varphi \in \mathcal{H}^0 \quad F_{\mu\nu} \varphi(x) = F_{\mu\nu}(x) \varphi(x + \hat{\mu} + \hat{\nu}),$$

ahol $F_{\mu\nu}(x) = \frac{i}{g} [U_\mu^+(x) U_\nu^+(x + \hat{\mu}) - U_\nu^+(x) U_\mu^+(x + \hat{\nu})] \in \Omega(G)$. Az $F_{\mu\nu}$ leképezés adjungáltjához $F_{\mu\nu}^+$ -höz hasonlóan rendelhető egy $F_{\mu\nu}^+(x)$ függvény. Ez azonban nem azonos az $F_{\mu\nu}(x)$ függvény adjungáltjával, $[F_{\mu\nu}(x)]^+$ -tel. Belátható azonban, hogy

$$F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^+ \varphi(x) = F_{\mu\nu}(x) [F_{\mu\nu}(x)]^+ \varphi(x).$$

A kontinuum elmélet analógiájára legyen a mértékelmélet hatása:

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} \text{Tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^+ = \frac{1}{2} \sum_{x \in \mathcal{R}^0} \sum_{\mu, \nu} \text{tr} \{F_{\mu\nu}(x) [F_{\mu\nu}(x)]^+\}. \quad (61)$$

Ez pedig nem más mint a Wilson-féle hatás (ld. a (60) azonosságot)!::

$$S = \frac{1}{g^2} \sum_{x \in \mathcal{R}^0} \sum_{\mu, \nu} \left\{ N_c - \frac{1}{2} \text{tr} U_{\mu\nu}(x) - \frac{1}{2} \text{tr} U_{\mu\nu}^+(x) \right\}, \quad (62)$$

ahol $U_{\mu\nu}(x) = U_\nu^+(x) U_\mu^+(x + \hat{\nu}) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu(x)$, $N_c = \dim V$. Mértéktranszformációkat az $\Omega :: \mathcal{H}^0 \rightarrow \Omega(G)$ típusú függvényekkel végzünk.

$$\varphi \in \mathcal{H}^0 \rightarrow \varphi^\Omega \in \mathcal{H}^0 \quad \varphi^\Omega(x) =: \Omega(x) \varphi(x).$$

Ha megköveteljük, hogy $\nabla_\mu \varphi$ ugyanúgy transzformálódjon, mint φ , akkor kapjuk a kovariáns derivált $\nabla_\mu[U]$ és U transzformációját:

$$\nabla_\mu[U^\Omega] = \Omega \nabla_\mu[U] \Omega^{-1}$$

$$U_\mu^\Omega(x) = \Omega(x + \hat{\mu}) U_\mu(x) \Omega^+(x)$$

$F_{\mu\nu}$ transzformáltja $F_{\mu\nu}^\Omega = \Omega F_{\mu\nu} \Omega^+$, a hatás pedig invariáns: $S^\Omega[U] = S[U^\Omega] = S[U]$.

Legyen a rács hossza időirányban $L_0 a$, térirányokban $L_i a$. L_μ pozitív egész szám. Ha mindegyik L_μ végtelenhez tart, a (62) alatti hatás az euklideszi metrikájú mérték-elméletet definiálja rácson. Ha $L_0 a = \beta$ véges, $L_i \rightarrow \infty$ $i = 1, 2, 3$, akkor (62) az $1/\beta$ hőmérséklethez tartozó rácossal regularizált effektív hatást adja. Ezzel a kanonikus állapotösszeg:

$$Z = \int \prod_{x \in \mathcal{H}^0} \prod_\mu dU_\mu(x) \exp \{-S[U]\} \quad (64)$$

$dU_\mu(x)$ bal- és jobbinvariáns mérték a színcsoporton.

A (23) alatti $W(\mathbf{x})$ mennyiség — minthogy geometriailag a konstans \mathbf{x} melletti, „hőmérsékletirányban” β periódusnyi párhuzamos eltolás mátrixának a spúrja, — a következőképpen teendő rácsra:

$$W(\mathbf{x}) = \text{tr } U_0(L_0 - 1, \mathbf{x}) U_0(L_0 - 2, \mathbf{x}) \dots U_0(1, \mathbf{x}) U_0(0, \mathbf{x}) \quad x_i \text{ egész.} \quad (65)$$

3.2. A Hamilton-formalizmus

Lagrange-formalizmusban a klasszikus rács-térelmélet definíciójából indultunk el és a Feynman-féle pályaintegrál segítségével származtattuk a kvantum rács-térelméletet. Hamilton-formalizmusban a kvantumelmélet szintjén indítunk a Hamilton-operátor definíciójával.

Legyen a 3-dimenziós rács minden élén egy $\hat{U}_i(\mathbf{x})$ téroperátor. $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ $i = 1, 2, 3$. Készítsük el az $\hat{U}_i(\mathbf{x})$ egymással felcserélhető operátorok által definiált térdiagonális reprezentációt. Ennek bázisát alkotják az $|U\rangle$ állapotok, amelyekre $\hat{U}_\mu^{\alpha\beta}(x)|U\rangle = U_\mu^{\alpha\beta}(x)|U\rangle$. A mágneses térből felépülő potenciális energia tehát

$$\hat{H}_M = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \text{Tr } \hat{F}_{ij} \hat{F}_{ij}^\dagger = \frac{1}{g^2} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{i,j} \left\{ N_c - \frac{1}{2} \text{tr } \hat{U}_{ij}(x) - \frac{1}{2} \text{tr } \hat{U}(x) \right\}, \quad (66)$$

ahol $\hat{U}_{ij}(\mathbf{x}) = \hat{U}_j^+(\mathbf{x}) \hat{U}_i^+(\mathbf{x} + \hat{j}) \hat{U}_j(\mathbf{x} + \hat{i}) \hat{U}_i(\mathbf{x})$. A kinetikus energia felírásához meg kell találnunk az elektromos tér operátorát. Ezt úgy fogjuk felismerni, hogy megkeressük azt az operátort, amelynek kovariáns divergenciája éppen az időfüggetlen mérték-transzformációkat generáló operátor, vagyis a Gauss-törvényt kifejező kényszer operátora.

Először definiáljuk azokat az operátorokat, amelyek $|U\rangle$ -ban az $U_\mu(x)$ -nek csoportelemmel való balról és jobbról szorzását generálják. Az

$$[\hat{L}_i^a(\mathbf{x}), \hat{U}_j^{\alpha\beta}(\mathbf{y})] = -T_a^{\alpha\gamma} \hat{U}_j^{\gamma\beta}(\mathbf{y}) \delta_{ij} \delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}} \quad (67)$$

$$[\hat{R}_i^a(\mathbf{x}), \hat{U}_j^{\alpha\beta}(\mathbf{y})] = \hat{U}_j^{\alpha\gamma}(\mathbf{y}) T_a^{\gamma\beta} \delta_{ij} \delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}} \quad (68)$$

csererelációk egyértelműen definiálják az $\hat{L}_i^a(\mathbf{x})$ és $\hat{R}_i^a(\mathbf{x})$ hermitikus operátorokat, mert ezekből következik, hogy

$$e^{i \sum_{j,\mathbf{x}} \sigma_j^a(\mathbf{x}) \hat{L}_j^a(\mathbf{x})} |U\rangle = |e^{i \sigma_j^a(\mathbf{x}) T_a} U_j(\mathbf{x})\rangle$$

$$e^{-i \sum_{j,\mathbf{x}} \sigma_j^a(\mathbf{x}) \hat{R}_j^a(\mathbf{x})} |U\rangle = |U_j(\mathbf{x}) e^{i \sigma_j^a(\mathbf{x}) T_a}\rangle.$$

Nyilvánvaló, hogy az egy élhez tartozó \hat{L}^a , illetve \hat{R}^a operátorok kielégítik a csoport generátorainak felcserélési szabályát, de az \hat{L} az \hat{R} -rel kommutál. Igaz továbbá, hogy az \hat{R} operátorok kifejezhetők az \hat{L} -ekkel:

$$\hat{R}_i(\mathbf{x}) = -\hat{U}_i^+(\mathbf{x}) \hat{L}_i(\mathbf{x}) \hat{U}_i(\mathbf{x}), \quad (69)$$

ahol bevezettük az $\hat{L}_i(\mathbf{x}) = T_a \hat{L}_i^a(\mathbf{x})$ és $\hat{R}_i(\mathbf{x}) = T_a \hat{R}_i^a(\mathbf{x})$ mátrixoperátorokat. (69)-nek szemléletes geometriai jelentést adhatunk, ha kiterjesztjük a párhuzamos eltolást a V értékű függvények \mathcal{H}^0 halmazáról, a $Gl(V)$ értékű függvényekre ($Gl(V)$ a V nem elfajuló lineáris transzformációinak a tere). Legyen \mathcal{H}^0 a $B: \mathcal{H}^0 \rightarrow Gl(V)$ függvények halmaza. Az i -vel való párhuzamos eltolás \mathcal{H}^0 -on \bar{P}_i , legyen olyan, hogy hagyja érintetlenül a skalárszorzatot (a skalárszorzatot ebben a fejezetben értelemszerűen a 3-dimenziós rácsra kell érteni):

$$(\eta, (\bar{P}_i B) \varphi) = (P_i^+ \eta, B P_i^+ \varphi) = \sum_{\mathbf{x}} \eta^+(\mathbf{x} + \hat{i}) U_i(\mathbf{x}) B(\mathbf{x}) U_i^+(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x} + \hat{i}) =$$

$$= \sum_{\mathbf{x}} \eta^+(\mathbf{x}) \{U_i(\mathbf{x} - \hat{i}) B(\mathbf{x} - \hat{i}) U_i^+(\mathbf{x} - \hat{i})\} \varphi(\mathbf{x})$$

ahonnan leolvasható $\bar{P}_i B$ \mathbf{x} helyen vett értéke. Hasonlóan kapjuk:

$$\begin{array}{ccccccc} -L_i(\mathbf{x} - \hat{i}) & & R_i(\mathbf{x}) & & -L_i(\mathbf{x}) & & R_i(\mathbf{x} + \hat{i}) \\ \hline & \xrightarrow{\quad} & & \xrightarrow{\quad} & & \xrightarrow{\quad} & \\ & \mathbf{x} & & U_i(\mathbf{x}) & & \mathbf{x} + \hat{i} & \end{array}$$

5. ábra. A jobb és bal oldali szorzás generátorai a vertikális tangensnyaláb vektorai

$$\bar{P}_i^+ B(\mathbf{x}) = U_i^+(\mathbf{x}) B(\mathbf{x} + \hat{i}) U_i(\mathbf{x}).$$

Ha tehát $L_i(\mathbf{x})$ -et egy $\mathbf{x} + \hat{i}$ -beli mennyiségnek tekintjük, akkor (69) szerint $R_i(\mathbf{x})$ -1-szerese annak, amit $L_i(\mathbf{x})$ -nek $-i$ irányba való párhuzamos eltolásával kapunk (ld. az 5. ábrát!).

Ha az Ω időfüggetlen mértéktranszformációt $\Omega(\mathbf{x}) = \exp[i g \omega^a(\mathbf{x}) T_a]$ módon paramé-

terezzük, akkor (63) illetve (67) és (68) szerint

$$\hat{U}_i^\Omega(\mathbf{x}) = -\hat{U}_i(\mathbf{x}) i g \omega^a(\mathbf{x}) T_a + i g \omega^a(\mathbf{x} + \hat{i}) T_a \hat{U}_i(\mathbf{x}) + O(\omega^2) = -i g [\hat{G}(\omega), \hat{U}_i(\mathbf{x})],$$

$$\text{ahol} \quad \hat{G}(\omega) = \sum_{\mathbf{x}} \omega^a(\mathbf{x}) \hat{G}^a(\mathbf{x}) \quad \text{és} \quad \hat{G}^a(\mathbf{x}) = \sum_j [\hat{L}_j^a(\mathbf{x} - \hat{j}) + \hat{R}_j^a(\mathbf{x})]. \quad (70)$$

Nyilván

$$[\hat{G}^a(\mathbf{x}), \hat{G}^b(\mathbf{y})] = i f^{abc} \hat{G}^c(\mathbf{x}) \delta_{\mathbf{x}\mathbf{y}}$$

és a $\hat{V}(\Omega) = e^{ig\hat{G}(\Omega)}$ operátor az állapotokon éppen az Ω mértéktranszformációt hajtja végre:

$$\hat{V}(\Omega)|U\rangle = |U^\Omega\rangle \quad (71)$$

$\hat{G}(\mathbf{x}) = T_a \hat{G}^a(\mathbf{x})$ tehát a keresett generátor, amit a kontinuumban $\hat{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{g} \sum_j \hat{D}_j \hat{E}_j$ alakban írtunk. \hat{D}_j a kovariáns deriválás a mátrixoperátorokon. \hat{D}_j a rácson: $\hat{D}_j = = \bar{P}_j^+ - 1$. Könnyű látni, hogy ezzel a kovariáns deriválttal \hat{G} a

$$\hat{G} = - \sum_j \hat{D}_j \hat{L}_j$$

alakba írható (észben tartva, hogy $\hat{L}_j(\mathbf{x})$ az $\mathbf{x} + \mathbf{j}$ ponthoz tartozik). Ezzel megtaláltuk az elektromos tér operátorát:

$$\hat{E}_i(\mathbf{x}) = -g \hat{L}_i(\mathbf{x} - \mathbf{i}).$$

A teljes rács-Hamilton-operátor tehát ((12) analógja fermionok nélkül):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{1}{2} g^2 \sum_i [\hat{L}_i^a(\mathbf{x})]^2 + \frac{1}{g^2} \sum_{i,j} (N_c - \text{tr } \hat{U}_{ij}(\mathbf{x})) \right\} \quad (72)$$

míg a fizikai térre vetítő operátor:

$$\hat{P} = \int D\Omega \hat{V}(\Omega) = \int \prod_{\mathbf{x}} d\Omega(\mathbf{x}) \hat{V}(\Omega) \quad \hat{P}^2 = \hat{P}. \quad (73)$$

Következő feladatunk a (72), (73) operátorok által definiált kvantumrendszer állapotösszegére egy funkcionálintegrál-előállítást megadni. A levezetés a 2.5.-beli levezetés mintájára történik, de most nem használunk két bázist (2.5.-ben az $|A\rangle$ és $|E\rangle$ bázis), hanem csak egyet. Az

$$e^{-\varepsilon \hat{H}} = \exp \left\{ -\varepsilon \frac{g^2}{2} \sum_{\mathbf{x}} \sum_i [\hat{L}_i^a(\mathbf{x})]^2 \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{\varepsilon}{g^2} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{i,j} (N_c - \text{tr } \hat{U}_{ij}(\mathbf{x})) \right\} [1 + O(\varepsilon^2)]$$

operátor $|U\rangle$ bázisban vett mátrixelemeinek meghatározásához elegendő az

$$e^{-\varepsilon \frac{g^2}{2} L^2}$$

szabad időfejllesztő operátor mátrixelemeit meghatározni a csoporton értelmezett komplex függvények terén. Ha a csoportelemeket $U = e^{ig\omega^a T_a}$ -val paraméterezzük, akkor ezek a függvények $f(\omega)$ alakúak. Ebben a reprezentációban.

$$\hat{L}^a = \frac{i}{g} \frac{\partial}{\partial \omega^a} + \frac{i}{2} f^{abc} \omega^c \frac{\partial}{\partial \omega^b} + O(g)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}^a \hat{L}^a = -\frac{1}{g^2} \frac{\partial^2}{\partial \omega^2} + O(g^0).$$

Gyenge csatolási limeszben, amikor $g \rightarrow 0$, tehát \hat{L}^2 a Laplace-operátorra válik a csoporttérén, sőt $g \rightarrow 0$ miatt az ω -ban mért csoporttér is tart az \mathbf{R}_{N_g} -térhez. Ezért

$$\begin{aligned} \langle \omega' | e^{-\frac{\varepsilon}{2} \hat{L}^2} | \omega \rangle &= \frac{1}{(2\pi\varepsilon g^2)^{N_g/2}} e^{-\frac{(\omega'^a - \omega^a)^2}{2\varepsilon}} \cdot \left[1 + O\left(\frac{g^2}{\varepsilon}\right) \right] \\ \langle U' | e^{-\varepsilon \hat{H}} \hat{P} | U \rangle &= \\ &= \int D\Omega \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{3f/8}} \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{x}} \left[\sum_i \frac{1}{2\varepsilon} (\omega_i'^a(\mathbf{x}) - \omega_i^{2a}(\mathbf{x}))^2 + \frac{\varepsilon}{g^2} \sum_{i,j} (N_c - \text{tr } U_{ij}(\mathbf{x})) \right] \right\} \times \\ &\quad \times \left[1 + O\left(\frac{g^2}{2}\right) + O(\varepsilon^2) \right], \end{aligned}$$

ahol $U_i'(\mathbf{x}) = e^{ig\omega_i'^a(\mathbf{x})T_a}$ és $U_i^\Omega(\mathbf{x}) = e^{ig\omega_i^{2a}(\mathbf{x})T_a}$. Felhasználva a

$$\frac{g^2}{2} (\omega'^a - \omega^a)^2 = 2N_c - \text{tr } U'^+ U - \text{tr } U + U' + O(g^4)$$

azonosságot, kapjuk:

$$\begin{aligned} \langle U' | e^{-\varepsilon \hat{H}} \hat{P} | U \rangle &= \\ &= \frac{1}{(2\pi\varepsilon)^{3f/8}} \int D\Omega \exp \left\{ - \frac{1}{g^2} \sum_{\mathbf{x}} \left[\frac{1}{\varepsilon} \sum_i (2N_c - \text{tr } U_i'^+(\mathbf{x}) \Omega(\mathbf{x} + \hat{i}) U_i(\mathbf{x}) \Omega^+(\mathbf{x}) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{tr } \Omega(\mathbf{x}) U_i^+(\mathbf{x}) \Omega^+(\mathbf{x} + \hat{i}) U_i'(\mathbf{x}) \right) + \varepsilon \sum_{i,j} (N_c - \text{tr } U_{ij}(\mathbf{x})) \right] \right\} \left[1 + O\left(\frac{g^2}{\varepsilon}\right) + O(\varepsilon^2) \right]. \end{aligned}$$

Ha tehát $\Omega(\mathbf{x})$ -et az \mathbf{x} pontból induló az U -t és U' -t összekötő $b = \varepsilon a$ hosszúságú időirányú élhez rendelt $U_0(\mathbf{x})$ csoportelemnek tekintjük, az állapotösszeg nem lesz más, mint egy aszimmetrikus (időirányban b , térirányokban a rácsállandójú) rácson felírt változata (64)-nek.

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr } \hat{P} e^{-\beta \hat{H}} = \\ &= \mathcal{N}_\beta \left(\frac{b}{a} \right) \int \prod_{\mathbf{x}} dU_\mu(x) \exp \left\{ - \frac{1}{g^2} \sum_{\mathbf{x}} \left[\frac{a}{b} \sum_i (2N_c - \text{tr } U_0^+(x) U_i^+(x + \hat{o}) U_0(x + \hat{i}) U_i(x) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \text{tr } U_i^+(x) U_0^+(x + \hat{i}) U_i(x + \hat{o}) U_0(x) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b}{a} \sum_{i,j} (N_c - \text{tr } U_j^+(x) U_i^+(x + \hat{j}) U_j(x + \hat{i}) U_i(x)) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (74)$$

ahol $\mathcal{N}_\beta(\varepsilon) = (2\pi\varepsilon)^{\frac{3}{8}L_0f} = (2\pi\varepsilon)^{\frac{3N_gL}{2}}$. Ne felejtjük el, hogy (74) csak $O(\varepsilon)$ és $O(g^2/\varepsilon^2)$ relatív hibával igaz, tehát nem elég, hogy ε nullához tartson, a g -nek is nullához kell tartania, mégpedig ε -nál gyorsabban. Tehát (74) abban a limeszben igaz, amikor az aszimmetria minden határon túl nő és vele együtt a kontinuum limeszhez közeledünk.

3.3. Klasszikus vákuum konfigurációk

Klasszikus vákuumnak fogjuk nevezni az olyan U konfigurációkat (szimmetrikus vagy aszimmetrikus) rácson, amelyekre $S[U]=0$. Ezeknek a feltérképezése azért érdekes, mert az időarányú periódikus határfeltétel és a (számítógépes felhasználás miatt célszerű) térirányú periodizálás is egymással nem mértékekvivalens osztályokra bontja a vákuumkonfigurációk halmazát. Ezek a konfigurációk fontosak lehetnek gyenge csatolási limeszben, ahol a nyeregpontok dominanciáját várjuk.

Mivel egy N_c dimenziós unitér mátrix spurjának valós része $-N_c$ és N_c közé esik, ezért a (62) hatás és (74)-beli aszimmetrikus rácson vett megfelelője nem negatív szám. $S[U]=0$ akkor és csak akkor, ha minden x -re

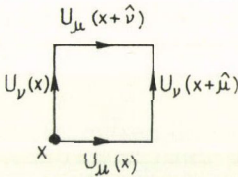
$$U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu(x) = U_\mu(x + \hat{\nu})U_\nu(x)$$

vagyis, ha a plakettek különböző oldalain vett (ld. a 6. ábrát) párhuzamos eltolások megegyeznek (zérus görbület).

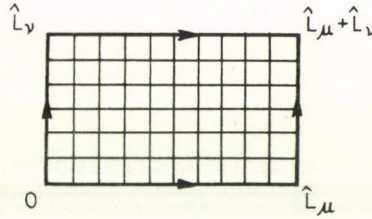
De akkor azonos a párhuzamos eltolás minden olyan az x -pontból az y -pontba vezető görbén (rácson törött vonal), amelyek egymástól egy plakettekkel kirakható felület határában különböznek. Jelölje az x -ből y -ba való párhuzamos eltolást a legrövidebb monoton növekvő pálya mentén $\mathcal{P}(y, x)$. (Monoton növekvő a pálya, ha minden lépésnél semelyik koordináta sem csökken.)

$$\mathcal{P}(y, x) = U_\mu(y - \hat{\mu})U_\nu(y - \hat{\mu} - \hat{\nu}) \dots U_\sigma(x).$$

A 7. ábrán látható felület, amely a 4-dimenziós tórusz $\mu\nu$ síkjában fekszik, szintén ilyen plakettekkel kirakható felület.



6. ábra. Az $(x, \mu\nu)$ plakett



7. ábra. A tórusz-rács $\mu\nu$ „síkja”

Mivel ennek határain a párhuzamos vonalakon a periodicitás miatt ugyanazok a csoportelemek állnak, ezért a görbületlenség a $\mathcal{P}(\hat{L}_\mu, 0)$ $\mu=0, 1, 2, 3$ csoportelemek felcserélhetőségéhez vezet ($\hat{L}_\mu = L_\mu \cdot \hat{\mu}$). Legyen V_μ a $\mathcal{P}(\hat{L}_\mu, 0)$ -nak valamely meghatározott L_μ -edik gyöke, mondjuk, ha

$$\mathcal{P}(\hat{L}_\mu, 0) = e^{i\alpha_\mu^a T_a}$$

akkor legyen $V_\mu = e^{i\frac{\alpha_\mu^a}{L_\mu} T_a}$. Igaz a következő állítás: Az U vákuum konfiguráció mértéktranszformációval az x -független V vákuum konfigurációba transzformálható. Azaz létezik olyan $\Omega: \mathcal{R}^0 \rightarrow SU(N_c)$ függvény, hogy

$$\Omega(x + \hat{\mu})U_\mu(x)\Omega^\dagger(x) = V_\mu. \quad (75)$$

Bizonyításként megadjuk ezt az $\Omega(x)$ -et:

$$\Omega(x) = V_0^{x_0} V_1^{x_1} V_2^{x_2} V_3^{x_3} [\mathcal{P}(x, 0)]^+. \quad (76)$$

(A bizonyításhoz (75) teljesülésén kívül azt is be kell látni, hogy a (76)-tal definiált függvény periodikus, vagyis egyértékű a tóruszon.)

Tehát minden $U_\mu(x)$ klasszikus vákuumkonfiguráció mérték ekvivalens egy olyan V_μ x -független vákuumkonfigurációval, amelyben a 4 V_μ csoportelem egymással felcserélhető. Azonban ezek között még mindig lesznek mértékekiválenssek. Ezeket már csak globális mértéktranszformáció kötheti össze. Egy globális mértéktranszformáció pedig a V_μ elemek sajátértékeit invariánsan hagyja, de sajátvektoraikat tet-szőlegesen (ortogonálisan) elforgatja. Minthogy a négy V_μ alkalmas globális transzformációval egyszerre diagonalizálható, ezért azok a V_μ és V'_μ konfigurációk lesznek mértékekiválenssek, amelyeknek a sajátértékkészletük azonos ($U(N_c)$ esetén bármilyen, $SU(N_c)$ esetén a páros permutációk erejéig).

Tehát a 4-dimenziós periodikus rácson definiált $SU(N_c)$ mértékelmélet klasszikus vákuumkonfigurációinak mértéktranszformációk szerinti ekvivalencia osztályai egyértelműen jellemezhetők a 4 darab $\{e^{i\varphi_\mu^1}, \dots, e^{i\varphi_\mu^{N_c}}\}$ $\mu=0, 1, 2, 3$ sajátértékkészlettel, amelyek mindegyike csak a sajátértékek páros permutációja erejéig rögzített, és amelyekre teljesül, hogy $\prod_{j=1}^{N_c} e^{i\varphi_j^a} = 1$. Ezek a sajátértékek a $\mathcal{P}(\hat{L}_\mu, O) \in SU(N_c)$ mátrixok sajátértékei.

Ha térirányokban végtelen rácsunk van, akkor a vákuumokat csak egy ilyen sajátértékkészlet jellemzi, a $\mathcal{P}(\hat{L}_0, O)$ -jé.

4. FEJEZET

A fázisátmenet

A nagy hőmérsékleten vagy sűrűségeen tapasztalt aszimptotikus szabadság fizikailag magyarázható a vákuumban nagy impulzusnál tapasztalt aszimptotikus szabadsággal, hiszen nagy hőmérsékleten a részecskék zöme igen nagy impulzussal rendelkezik. Nagy sűrűségnél ez az impulzus a kvarkok Fermi-impulzusa. Ugyanúgy, ahogy a vákuumban a kvarkbezárás és az aszimptotikus szabadság egyszerre létezett, a véges hőmérsékleten és sűrűségeen bekövetkező kvarkfelszabadulással járó fázisátalakulás sem mond ellent az „abszolút confinement” fogalmának. Képzeljünk el ugyanis egy nagy hőmérsékletű vagy sűrűségű, de véges térfogatú kvark-gluon rendszert, amely a szabad fázisban van. Ez a szabadság azonban csak viszonylagos. Ha egy kvark el akarja hagyni a véges térfogatot, a rendszer határán érezni fogja a kvarkbezáró effektust és vagy színtelen hadronná egészül ki, vagy visszatér a rendszerbe. Minthogy technikai okok miatt egyszerűbb lesz végtelen térfogatú vagy periodizált (és ezért határ nélküli) rendszerrel foglalkozni, a kvarkfelszabadulás fent említett viszonylagossága abban fog megjelenni, hogy a szabad fázisban a kvarkok és gluonok más vákuumállapothoz képest lesznek szabad kvarkok és gluonok, mint amilyen vákuumállapotra a hadronok épülnek. Az elsőt perturbatív a másodikat fizikai vákuumállapotnak nevezzük.

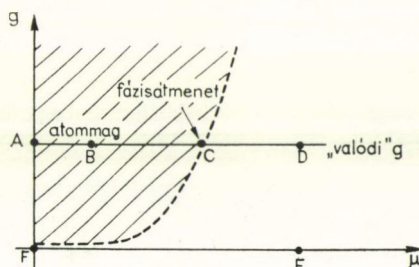
A fejezet első részében (4.1., 4.2.) egy olyan módszert mutatunk be, amellyel ennek a fázisátmenetnek a termodinamikai sajátosságai tanulmányozhatók. A hátralevő részben pedig (4.3., 4.4. és 4.5) a Monte Carlo szimulációról lesz szó, amellyel meghatároztuk a fermionok nélküli $SU(2)$ mértékelmélet kritikus hőmérsékletét és a kvark-antikvark potenciál viselkedését a hőmérséklet függvényében.

A Monte Carlo módszert újabban egyre elterjedtebben használják rácstérelméletek numerikus vizsgálatára. Előnye az, hogy olyan csatolási állandók esetén ad információt a modellről, amely távol esik mind a gyenge mind az erős csatolású lime-sektől, ahol perturbatív számolások léteznek. Véges hőmérsékletű mértékelméltre Monte Carlo szimulációt elsőként mi alkalmaztunk. A módszer nemcsak termodinamikai mennyiségek „mérését” teszi lehetővé, hanem a fázisátalakulás tér-idő szerkezetéről is számot tud adni. Egyelőre nyitott kérdés, hogy hogyan lehet fermiontereket kezelni ilyen módon.

4.1. A kvark-gluon nyomás és a zsákállandó

Nem perturbatív számolásokból (instantonok) tudjuk, hogy a fizikai vákuum energiája a perturbatív vákuum energiája alatt van. A zsákmodellből kölcsönzött elnevezéssel a két energiasűrűség különbségét zsákállandónak fogjuk nevezni és B -vel jelöljük: $B = (E_{\text{PERT. VÁK.}} - E_{\text{FIZ. VÁK.}})/V$. Ez azt eredményezi, hogy a fizikai vákuum nyomása B -vel nagyobb a perturbatívénál. Ha a nyomás nullpontját a fizikai vákuumban rögzítjük, akkor a perturbatív vákuum nyomása $-B$.

B jelenléte egy olyan nemperturbatív effektus, amit az I termodinamikai potenciál perturbatív számításánál figyelembe kell vennünk, ha a nyomás viselkedését végig akarjuk követni a hadron anyag sűrűségétől a kvark-gluon anyag sűrűségéig. Az egyszerűség kedvéért legyen $T=0$, és képzeljük el, hogy a fizikai vákuumban elkezdjük a barionsűrűséget növelni. (A 8. ábrán az A pont.) Egy idő után elérjük az atommag sűrűségét (B pont). A magsűrűség felett valahol (C pont) bekövetkezik a fázisátmenet és a hadronokból kvark-gluon gáz válik. A D pontban az anyag már olyan sűrű, hogy ésszerűnek látszik feltételezni, hogy itt a perturbációs számítás érvényes. Próbáljuk a 8. ábra (g, μ) síkjára felrajzolni mindazt az információt, amit a nyomásról tudunk. Az A pontban a nyomás definíció szerint 0. A B ponton át a C pontig a nyomás monoton nő, de folytonosan. A C fázisátmeneti pontban a nyomás szinguláris (töréspont, vagy annál enyhébb szingularitás). Ha ez töréspont, ami első rendű fázisátmenetet jelent, akkor a C -től jobbra ugrásszerűen nagyobb a sűrűség. A D pont környékén és a DE szakaszon a nyomás változását az (55), (58) perturbatív képletek adják meg $\left(p = -\frac{I}{V}\right)$. Az EF szakaszon szintén, mert ez egy szabad elmélet. F -ben a nyomás a perturbatív vákuumé: $-B$. Az ábrán satírozott területtel je-



8. ábra. A nyomás tanulmányozásához (Magyarázatát lásd a szövegben!)

löltem azt a tartományt, ahol a perturbációs számítás biztosan nem használható. Rög-tön látjuk, hogy az (55), (58) perturbatív eredmény így, ahogy áll, hibás. Tudniillik ez a nyomás a DEF vonalon haladva F -ben eltűnik. A hiba forrása az ott használt renormálási feltétel, amely az I -ben levő konstanszt rögzítette. Ha figyelembe vesszük, hogy a perturbatív nyomás az FA vonalon nem veszi fel a B nem perturbatív eredetű járulékot, akkor a helyes renormálási feltétel a termodinamikai potenciálra:

$$I(g, V, T, \mu)|_{T=\mu=0} = BV.$$

Innen a perturbatív nyomás (QCD , N_f fajta 0 tömegű kvark):

$$\begin{aligned} p(T, \mu) = & \frac{8\pi^2}{45} T^4 \left(1 - \frac{15}{16} \frac{g^2}{\pi^2}\right) + \frac{7\pi^2}{30} N_f T^4 \left(1 - \frac{25}{84} \frac{g^2}{\pi^2}\right) + \\ & + N_f \left(\frac{\mu^2 T^2}{2} + \frac{\mu^4}{4\pi^2}\right) \left(1 - \frac{g^2}{2\pi^2}\right) - B. \end{aligned} \quad (77)$$

4.2. A kvarkanyag-maganyag fázisdiagramm

A termodinamikai potenciál C -pontbeli szingularitását semmilyen modellben nem tudjuk imitálni. Azonban, ha a két fázisra két különböző modellt használunk, akkor a fázisegyensúly feltételeiből, $T_1 = T_2$, $\mu_1 = \mu_2$, $p_1 = p_2$, a fázisátalakulási pont meghatározható. A maganyagot a Walecka-féle átlagtér-közelítésben modelleztük (25), a kvarkanyagot pedig a (77) állapotegyenletnek a renormcsoporttal feljavított változatával. Ha $T \ll \mu$, de széles μ tartományon akarunk érvényes kifejezést kapni a termodinamikai potenciálra, akkor az $\ln \mu/s$ típusú logaritmusokat kell felösszegezni, amit (77)-ben a

$$g^2 \rightarrow \bar{g}^2(\mu) = \frac{24\pi^2}{29 \ln \mu/\Lambda} \quad (78)$$

helyettesítéssel vettünk figyelembe. Minthogy a (77) másodrendű nyomás, mint g függvénye független a levonási sémától, a sémfüggés a (78)-beli Λ -paraméter numerikus értékében van elrejtve. Amíg a nyomásnak több sémára érvényes magasabb rendű alakja nem ismert, addig nincs értelme elkötelezni magunkat egyik mellett sem. Csupán annyit mondhatunk majd, hogy feltevéseinkkel milyen Λ értékek konzisztensek.

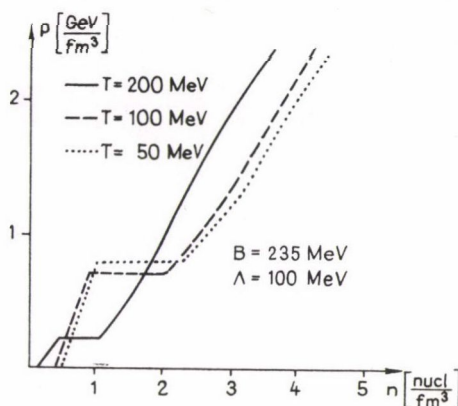
Akkor várhatjuk, hogy ez a két közelítő állapotegyenlet jól írja le a rendszert a fázisátalakulás környékén, ha az erősen elsőrendű, vagyis messze vagyunk a kritikus ponttól (ha van), tehát nagy a sűrűségugrás. Ekkor ugyanis az egymással egyensúlyt tartó két fázis tulajdonságaiban nagyon különbözik egymástól. Mindkettő a fázisátalakulási ponttól távol levő állapothoz hasonlít.

Numerikus számolásainkban a B zsákállandó 235 MeV, ahogy azt [26]-ban a zsákmodellnek a $c\bar{c}$ és $b\bar{b}$ állapotokra vonatkozó jóslataiból meghatározták. Érdekes tény, hogy ha B -t nullának vesszük, a Walecka-modell és a perturbatív QCD nem tud termodinamikai egyensúlyba kerülni.

A 9. ábrán a nyomás-sűrűség síkon az izotermákat rajzoltuk fel. Mint látjuk a kvark-gluon rendszer még kvalitatíve sem hasonlít a Van-der-Waals rendszerre.

A hőmérséklet növelésével csökken az átmeneti pontban a nyomás és a sűrűség értéke.

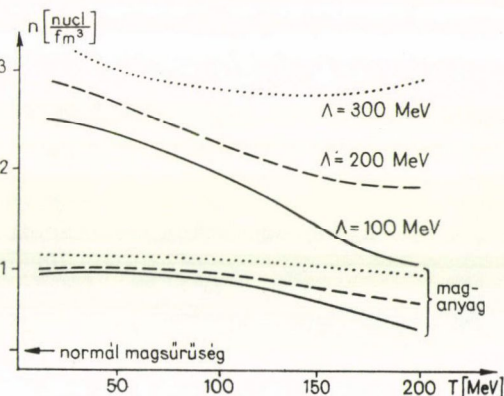
A 10. ábrán az átmeneti sűrűségértékeket tüntettük fel a hőmérséklet függvényében különböző Λ értékek mellett. Mivel az átmeneti sűrűségeknél a kvark kémiai potenciálja csak enyhén változik a Λ -hoz képest (pl. $T=100$ MeV-nél 650 és 800 MeV között), ezért csak $\Lambda=100$ MeV-nél lesz a (78) futó csatolási állandó elfogadhatóan kicsi. Figyeljük meg $\Lambda=100$ MeV-nél az átmeneti kvarksűrűség drámai csökkenését. Ha fantáziánkat kissé elengedjük, azt is mondhatjuk, hogy a kritikus pont, ha van, akkor 200 MeV hőmérséklet fölött és nulla sűrűség környékén található.



9. ábra. Izotermák a kvarkanyag-maganyag rendszerben

4.3. Monte Carlo módszer a véges hőmérsékletű rács SU(2) elméletre

A (64) és (62) által definiált állapotösszeget szeretnénk meghatározni SU(2) csoport esetén numerikusan. Egy 10^4 rácpontot tartalmazó periodikus rács esetén ez egy 40 000 változós integrál, amelynek minden változója az SU(2) csoporton fut végig. Az ilyen hatalmas változós számú integrálok kiszámítására alkalmas a Monte Carlo módszer [27]. Ennek az a lényege, hogy a sokdimenziós integrált az integrandusnak véletlen pontokban felvett összegével közelítjük, s a véletlen pontok sorozatát szukcesszív módon határozzuk meg. Kiindulunk egy a priori valószínűséggel választott véletlen pontból vagy egy előre rögzített fix pontból és bizonyos átmeneti valószínűségek szerint lépünk az integrálási változók terében. Az átmeneti valószínűségeket úgy kell megválasztani, hogy egy Markov folyamatot kapjunk, melynek hátteloszlása éppen a kívánt függvénnyel arányos. Mi a véges hőmérsékletű SU(2) számolásunkban az *M. Creutz* által javasolt „hőfürdőt” használtuk a lépegetési valószínűségek definiálására. [29]



10. ábra. Az átmeneti sűrűségek a hőmérséklet függvényében három különböző Λ érték mellett

A Monte Carlo-módszer tárgyalásánál érdemes a (64) vagy a (74) állapotösszegegügy ránézni, mint egy négydimenziós klasszikus statisztikus rendszer állapotössze-

gére, amelyben a hőmérséklet g^2 és amelyben a valódi fizikai hőmérséklet a rendszer egyik méretében jelenik meg.

Legyen $F(U)$ egy fizikai mennyiség a rácson, amelynek átlaga a (64) vagy (74) állapotösszeg segítségével így írható:

$$\langle F \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{x, \mu} dU_{\mu}(x) F(U) e^{-S(U)}.$$

Tegyük fel, hogy van egy Markov folyamatunk az U konfigurációk terében, amelynek határeloszlása $p_{\infty}(U) = \frac{1}{Z} e^{-S(U)}$, akkor a Markov-lánc elegendően sok lépése után bármilyen $U(1), U(2), \dots, U(n)$ pontsorozatot veszünk, az

$$\langle F \rangle_{\text{M.C.}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n F(U(c))$$

átlag az egzakt átlagot tetszőlegesen megközelíti 1-hez tetszőlegesen közeli valószínűséggel.

Most lássuk, hogy a „hőfürdő” milyen átmeneti valószínűségekkel éri el a fent említett határeloszlást. Legyen U tetszőleges konfiguráció és (x, μ) valamelyik él a rácson. Hozzuk termikus egyensúlyba az $U_{\mu}(x)$ változót a g^2 „hőmérsékletű” hőartállyal, miközben a többi U változót rögzítjük. Ekkor annak a valószínűsége, hogy az $U_{\mu}(x)$ változó $U'_{\mu}(x)$ értékre ugrik arányos $\exp[-S(U')]$ -vel. Ismételjük meg ezt sorban az összes élre. Ezt az eljárást, miközben egyszer végigfutunk a rács összes élén — egyenként hőfürdőhöz érintve őket —, nevezzük egy iterációnak. Néhányszor tíz iteráció után már az így generált U konfigurációk (a minták) egy közel egyensúlyi statisztikus sokaság elemeinek tekinthetők.

Említsünk meg néhány, a számítógép kapacitását érintő problémát. Mivel a „hőfürdőt” lokálisan alkalmaztuk, egy csoportelemet csak a szomszédos 6 plakett változóival hoztuk egyensúlyba, ezért a mintákban hamarabb áll be a kis távolságú egyensúly, mint a nagy távolságú. Ez azt jelenti, hogy egy lokális mennyiség (pl. plakett várhatóérték, plakett-plakett korrelációs függvény) átlagértékének Monte Carlo számolásához kevesebb iteráció elég (10–30), mint az olyan globális mennyiség kiszámolásához, amilyen a (65) W-hurok (50–150 iteráció). Másik probléma, ami az elmélet g -ben való feltérképezését limitálja az, hogy $g^2 \approx 0,5$ -nél kisebb csatolási állandóknál már az e^{-S} annyira kicsi szám, hogy a számítógépben minden effektus eltűnik.

A harmadik, részben elméleti vonatkozású probléma a klasszikus vákuumokkal kapcsolatos (3.3.). Gyenge csatolásnál azt várjuk, hogy a rendszer zömmel a vákuum konfigurációk környékén tartózkodik. A mintáknak tehát egyenletesen kellene eloszlaniuk ezek között. Azonban, ha a rendszer bejutott az egyik vákuumba, akkor innen csak nagyon kis valószínűséggel tud egy másikba átlépni. Igaz, hogy a Gibbs-faktor e^{-1/g^2} szerint elnyomja a nem vákuum irányokba való lépés valószínűségét, viszont a vákuumirányok száma $SU(2)$ esetén 4, a nem vákuumirányoké pedig a rácspontok számával, L -l arányos. Tehát annak a valószínűsége, hogy az egyik vákuum-

ból egy másikba lépünk $\sim \frac{1}{L} e^{1/g^2}$, ami lehet igen kicsi; vagyis a rendszer beszorul az egyik vákuumszektorba. A következő paragrafusban látni fogjuk, hogy a valóságban ez a probléma nem olyan súlyos, mint amilyennek így látszik. Egy numerikusan talált jelenség menti meg a helyzetet.

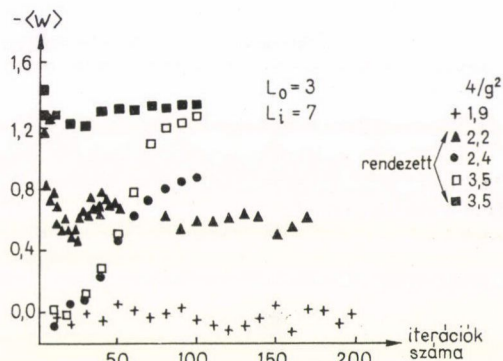
4.4. Numerikus eredmények

A $\langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{x}) \rangle$ korrelációs függvényen kívül a $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ átlagértéket fogjuk számolni. $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ -nak nem tudjuk a közvetlen fizikai jelentését, tudniillik az egy kvark szektor állapotösszege nem lehet, mert a periodikus határfeltétel miatt a Gauss-törvény nem elégíthető ki, az egy kvark szektor ortogonális a fizikai állapotokra. Mégis a $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$, mint rendparaméter jól használható a kérdéses fázisátmenetnél. Az adatok azt mutatják, hogy valahányszor egy mintán a $\langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{x}) \rangle$ korrelációs függvény exponenciálisan levág egy két rácsállandónyi távolságon, ugyanakkor a $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ rendparaméter is mindig ezrelék pontossággal 0 körül van. Ha pedig $\langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{x}) \rangle$ egy nem nulla konstanshoz tart, akkor ugyanezt teszi $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ is.

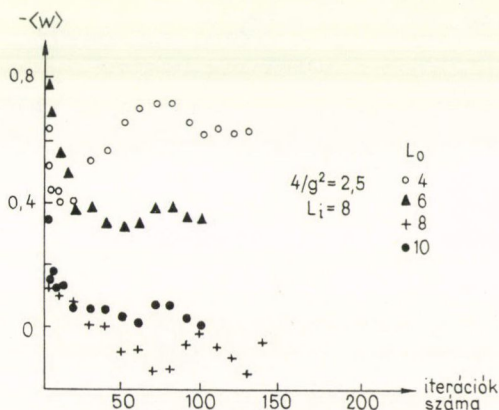
A 11. ábrán a rendparamétert tüntettük fel szimmetrikus rácson (Lagrange-formalizmus) különböző csatolási állandó értékek mellett, ahogy az iterációk során változik. $\beta = 3a$ rögzített. A futások egyöntetűen a 100. iteráció környékén konvergálnak be egy fix értékhez. Annak, hogy ez tényleg konvergencia, megnyugtató tesztje a $4/g^2 = 3,5$ esetén rendezetten és rendezetlenül indított futások összetartása. (Rendezetlen az indítás, ha a kezdeti állapot teljesen random, rendezett, ha minden csoportelem ugyanaz.)

A 12. ábrán különböző hőmérsékletekre mutatjuk a rendparaméter alakulását. Mint látható a hőmérséklet növelésével a $|\langle W(\mathbf{o}) \rangle|$ is nő.

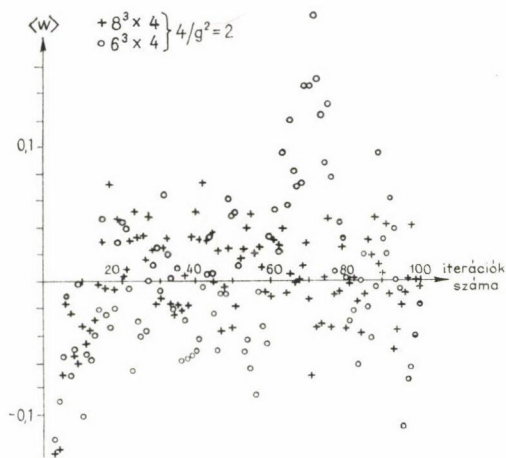
Vegyük észre, hogy nem triviális dolog az, hogy nullától különböző $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ egyáltalán előfordulhat. Van ugyanis a modellnek néhány olyan diszkrét szimmetriája,



11. ábra. A rendparaméter változása az iterációk során



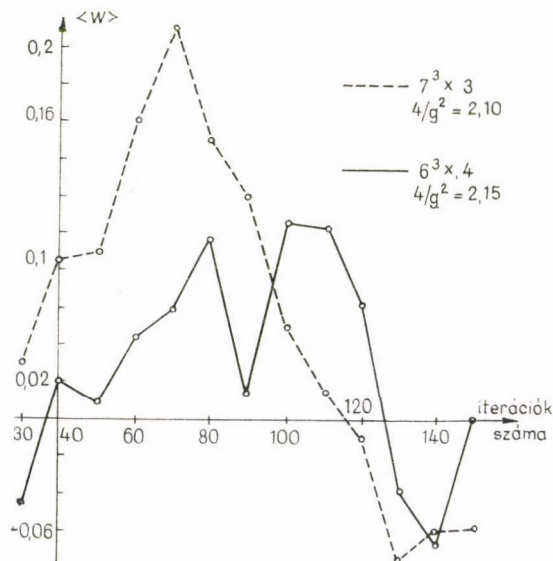
12. ábra. A rendparaméter különböző hőmérsékletek esetén. Minden futás rendezett indítású. $\beta > 10a$ esetén a rendparaméter eltűnik a zajban



13. ábra. A fluktuációk összehasonlítása a bezáró fázisban 6^3 -ös és 8^3 -ös térbeli méreteknél

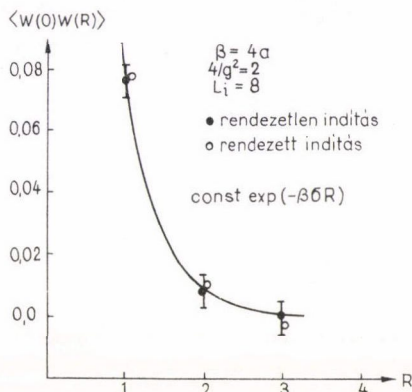
amelyeknél $W(0)$ előjelet vált. Ilyen szimmetria például, ha egy $x_0 = \text{const.}$ hipersíkban minden időarányú élen az U_0 változót -1 -szeresére cseréljük. Erős csatolásnál és nagy L_0 esetén ez a szimmetria meg is valósul, W a nulla körül fluktuál. A zaj nagysága a rács térbeli méreteinek növelésével csökken (13. ábra). Gyenge csatolásnál és kis L_0 -nál a W kisebb időre felvesz egy nullától különböző értéket, majd átbillen ennek -1 -szeresébe és ott tartózkodik 10–20 iteráción keresztül. Az az idő, amennyit a rendszer a pozitív vagy negatív „átlagérték” körül tartózkodik a rács térbeli méreteinek növelésével nő (14. ábra). Véges térfogatú rendszerünk a spon-

tán (dinamikai) szimmetriasértés tipikus jeleit mutatja (lásd a III. Függelék!). Ez a jelenség megoldja az előző paragrafusban említett vákuumproblémát. A szimmetriasértés fog dinamikailag beállítani néhány preferált vákuumot, amelyek környékén a rendszer szívesen elidőz, és így a vákuumok közötti közlekedés kérdése fel se vetődik.

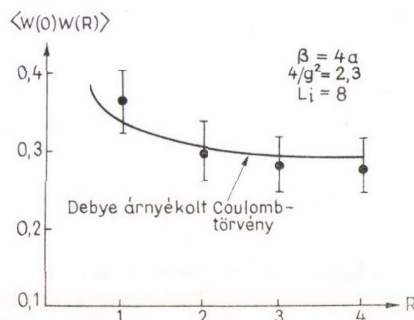


14. ábra. A hidegebb és gyengébb csatolású rendszer is könnyebben billen át, mert kisebb a térfogata. Az áttekinthetőség kedvéért a rendparaméter értékeit 10 iterációnként átlagoltuk

A nullától különböző $\langle W(\mathbf{o}) \rangle$ bizonyos rendeződést, erős kölcsönhatást jelent a Wilson-hurok mentén található U_0 változók között. Ennek a rendeződésnek a kialakulásával egyidőben jelenik meg a korreláció az egymástól térszerűleg elválasztott U_0 elemek között és a $\langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{x}) \rangle$ korrelációs függvény nem zérus értéket vesz fel nagy távolságon. A 15. és 16. ábrán a rendezetlen, bezáró fázisban, illetve a rendezett, szabad fázisban láthatjuk a korrelációs függvény viselkedését. Az elsőt jól közelíti a $\text{const} \cdot e^{-\beta\sigma R}$ függvény, ha a dimenziótlatlan tenzió $d^2\sigma(\beta)=0,54$. Creutz 8^4 -es rácson 0,6-ot mér ugyanennél a csatolási állandónál. A 16. ábrán látható korrelációs függvény egy Debye árnyékolt Coulomb-törvénnyel konzisztens az adott hibákon belül.

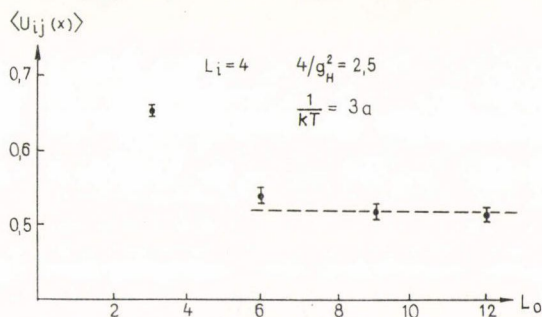


15. ábra. A korrelációs függvény a bezáró fázisban

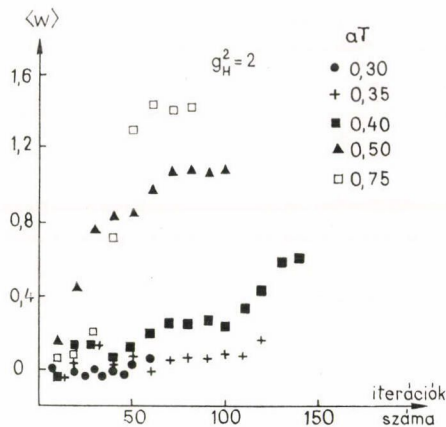


16. ábra. A korrelációs függvény a Coulomb-fázisban

Hamilton-formalizmusnál olyan aszimmetrikus rácson kell számolni, amelyek már elég jól imitálja a folytonos időkoordinátát. A 17. ábra azt mutatja, hogy ha az időirány 4-szer olyan sűrűn van beosztva, mint a térirány, akkor a fizikai mennyiségek már felveszik a határértékeiket. A 18. ábra a Hamilton-formalizmusban számolt rendparaméter értéket tünteti fel $g_H^2=2$ esetén különböző hőmérsékletekre.



17. ábra. Térszerű plakett várható értéke Hamilton-formalizmusban az időirányú beosztás függvényében



18. ábra. Rendparaméter értékek
Hamilton-formalizmusban

4.5. A kontinuum limesz

A kontinuum elméletben használt renormcsoport a renormált mennyiségekkel dolgozik és azt fejezi ki, hogy a renormáltan mennyiségek függetlenek a levonási ponttól. Ennek a renormcsoportnak létezik egy duálisa, amelyik a csupasz mennyiségek nyelvén azt fejezi ki, hogy a renormált mennyiségek nem függenek a levágási hosszától, ha a levágási hossz már elég kicsi. Rácsregularizálás esetén ez azt jelenti, hogy ha egy fizikai mennyiséget különböző rácscsatolóknál kiszámítunk, majd a csatolási állandót az a függvényében úgy változtatjuk, hogy a fizikai mennyiség a -tól ne függjön, akkor az így kapott $g(a)$ futó csupasz csatolási állandó kis a -kra már független lesz attól, melyik fizikai mennyiséget rögzítettük. Ha ez nem teljesül, akkor a rács nem definiál egy értelmes kontinuum-elméletet.

Rácson gyenge csatolási limeszben kiszámítható a duális renormcsoport β -függvényének első tagja és megegyezik a kontinuum-elméletben számítottal [28]. Természetesen azt várjuk, hogy a fizikai mennyiségek függésében még szingularitást okozó második tag is ugyanaz lesz a rácson, mint a kontinuumban. Ekkor egy tömeg dimenziójú fizikai mennyiség, mint például a kritikus hőmérséklet, a kvark-nélküli SU(2) rácselméletben a következőképpen függ g -től:

$$T_c = C \frac{1}{a} [g^2(a)]^{-\frac{51}{121}} \exp \left\{ -\frac{12\pi^2}{11g^2(a)} \right\} \equiv C \cdot \Lambda. \quad (79)$$

A jobb oldalon szereplő, a rácsregularizálásra jellemző Λ paraméter összeköthető a kontinuum-elmélet bármely levonási eljárásához tartozó Λ -paraméterével [28].

A 19. ábrán a Lagrange-formalizmusban meghatározott kritikus hőmérsékleteket tüntettük fel különböző csatolási állandók esetén. $4/g^2 = 2,1$ -től felfelé az adatok pontosan követik a (79) renormcsoport képletet. Azt találtuk tehát, hogy a $g^2 < 2$ csatolási állandó már a kontinuum elméletet jól közelíti legalábbis a kritikus hőmér-

séklet szempontjából. Ugyanez mondható el a tenzióról is Creutz nulla hőmérsékletű tenzió számolásában [29].

Az adatokból a (79)-beli konstans értéke is meghatározható. Creutz meghatározta a tenzió és a Λ paraméter kapcsolatát: $\Lambda = (1,3 \pm 0,2) \cdot 10^{-2} \sqrt{\sigma(0)}$ [30]. Ebből és (79)-ből a kontinuumelmélet kritikus hőmérséklete a nulla hőmérsékletű tenzióval kifejezhető:

$$T_c = (0,35 \pm 0,05) \sqrt{\sigma(0)}. \quad (80)$$

Ha $\sigma(0)$ -ra elfogadjuk a Regge-trajektóriák meredekségéből becsült $0,2 \text{ GeV}^2$ értéket, akkor

$$T_c = 160 \pm 30 \text{ MeV}$$

(79)-ben nem vettük figyelembe, hogy a véges hőmérsékletű Lagrange-formalizmusú rács számolásokban a g nem csak az a -tól, hanem a T -től is függ. Ha a Coulomb-mértékben kiszámolt kis távolságokra érvényes (47) futó csatolási állandót használjuk, akkor a hőmérsékletfüggetlen fizikai mennyiségek (mint pl. a T_c) általános alakja vezetődik (ld. (46)-ot):

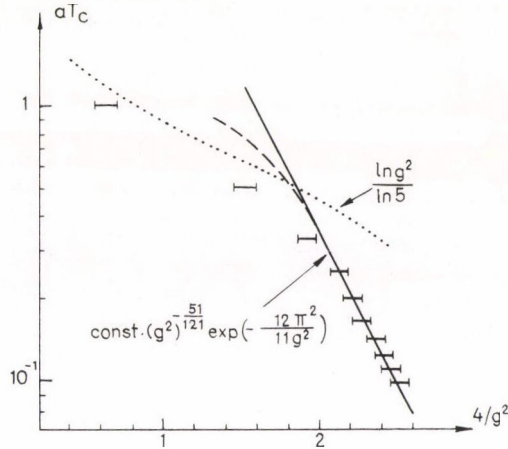
$$T_c = C \frac{1}{a} \exp \left\{ -\frac{12\pi^2}{11} \left(\frac{1}{g^2(a, T)} + \frac{1}{9} T^2 a^2 \right) \right\}.$$

Ez a korrekció azonban csak ott válik jelentőssé, ahol az egyéb gyenge csatolási képletek is érvényüket veszítik (19. ábrán a szaggatott vonal).

A 19. ábra adatai megerősítik azt is, hogy az erős csatolásra érvényes vortex-kondenzációs modellből kapott $T_c = a\sigma(0)/\ln 5$ kritikus hőmérséklet — amit az ábrán pontozott vonallal jelöltünk — valóban felső korlátot ad a valódi kritikus hőmérsékletre.

Hamilton-formalizmusban g_H végig csak az a -nak függvénye. A g_H a -függésében megjelenő Λ -paraméter, a Λ_H , nem feltétlenül ugyanaz, mint a (79)-ben szereplő Λ .

A 18. ábrán látható, hogy $g_H^2=2$ -ben a kritikus hőmérséklet: $T_c a = 0,32 \cdot 4/g_H^2 = 2,15$ -ben $T_c a = 0,22$ -t találtunk. A két pont a hibahatáron belül illeszkedik a 19. ábra renormcsoporthoz való illeszkedéséhez. Azt kell tehát mondanunk, hogy a Hamilton- és Lagrange-formalizmus Λ -paramétere a mérési hibán belül azonos: $\Lambda_H \approx \Lambda$.



19. ábra. A kritikus hőmérséklet, mint g függvénye követi a kontinuum elmélet renormcsoporthoz való illeszkedését (folytonos vonal). A szaggatott vonal a hőmérsékletfüggetlőségi korrekció a renormcsoporthoz, a pontozott vonal egy erős csatolási becsülés

ÖSSZEFOGLALÁS

Manifeszt mértékinvariáns módon levezettük a mértékelméletek nagykanonikus állapotösszegét előállító funkcionálintegrált.

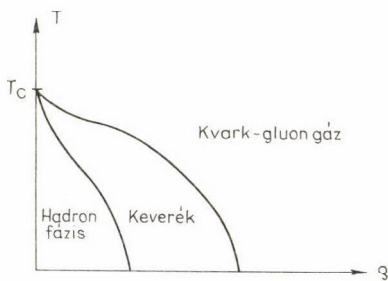
A perturbációs számítás legalacsonyabb nemtriviális rendjében különböző hőmérsékletfüggő renormálási eljárások esetén kétparaméteres renormcsoport-egyenleteket konstruáltunk, és meghatároztuk a sztatikus kvark-antikvark pár között ható erő-törvény nagy hőmérsékleti aszimptotikáját. Láttuk, hogy ez az erő zérussá válik, ha a hőmérséklet minden határon túl nő. Ezzel bebizonyítottuk, hogy a QCD magas hőmérsékleten olyan fázisban van, amelyben a nehéz kvarkok szabadok.

Megmutattuk, hogy véges hőmérsékleten a termikus Wilson-hurkok $\langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{R})^* \rangle$ korrelációs függvényének logaritmus a mérték méri a nehéz kvarkok szabad energiáját.

Monte Carlo módszerrel SU(2) mértékelméletben meghatároztuk azt a T_c kritikus hőmérsékletet, ahol az $\ln \langle W(\mathbf{o})W(\mathbf{R})^* \rangle$ a bezáró fázisra jellemző R -ben lineáris viselkedésből a szabadfázisra jellemző Debye-árnyékolt Coulomb viselkedésre vált. A T_c kritikus hőmérséklet, mint a g csatolási állandó függvénye jól követi a kontinuum elmélet renormcsoportja által a fizikai mennyiségekre megkövetelt törvényt. Innen $T_c = 0,35 \sqrt{\sigma(0)}$ a kritikus hőmérséklet a kontinuumban, ahol $\sigma(0)$ a tenzió zérus hőmérsékleten. A tenzióra vonatkozóan további feltevésekkel élve ez $T_c = 160 \text{ MeV} = 1,86 \cdot 10^{12} \text{ K}$ hőmérsékletnek felel meg.

A perturbatív QCD-t és a maganyag Walecka-féle mean field modelljét felhasználva 200 MeV hőmérsékletig feltérképeztük a kvarkanyag-maganyag kétfázisú rendszer nyomás-sűrűség diagramját. Ha ezt a fázisdiagramot összevetjük a kvark nélküli SU(2) modellben talált kritikus hőmérséklet tényével és hozzátesszük, hogy az SU(2)-ről SU(3)-ra való áttéréstől

minőségi változást nem várunk, akkor QCD-re a 20. ábrán látható kvalitatív fázisdiagramot rajzolhatjuk fel.



20. ábra. A kvark-gluon anyag valószínű fázisdiagramja

A további vizsgálatok szempontjából a legígéretesebb a véges hőmérsékletű térelméleti modellek Monte Carlo szimulációja. Hadd említsek néhány megoldásra váró problémát ezen a területen. Megtaláltuk ugyan a fázisátmenetet bizonyos termodinamikai változók nyelvén, nem tudjuk azonban, hogy ennek milyen tér-idő struktúra felel meg (pl. zsák kép). Az állapotösszeg, illetve a termodinamikai potenciál meghatározása nem-ábeli mértékelméletekre eldöntendő, hogy magas hőmérsékleten valóban szabadnak

tekinthetők ezek a modellek vagy sem. Fermionterekre naívan nem található olyan lokális, pozitív valószínűségeloszlás, ami bozonterekre létezik és amely a Monte Carlo-módszer alapja. Ezért nagy előrelépést jelentene egy olyan hatékony eljárást találni, amely a fermionokat is beépíti a Monte Carlo-módszerbe.

I. FÜGGELÉK

Tér diagonális reprezentáció fermionokra

Először definiáljuk a Grassman-algebra fogalmát! Legyen V egy lineáris tér a komplex számtest felett. A $\mathcal{T} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} V^{\otimes n}$ tenzor algebra a V -beli elemek n -szeres tenzorszorzatainak ($n=1, 2, \dots$), valamint az I egységelemnek a lineárkombinációiból áll. \mathcal{T} -nek a $v_i v_j + v_j v_i$ ($v_i, v_j \in V$) elemek által generált \mathcal{I} ideálja szerinti faktoralgebráját nevezzük Grassman-algebrának: $G = \mathcal{T}/\mathcal{I}$, V -t pedig a G bázis-terének. Ha V -n egy involúció adott ($v \in V \rightarrow v^+ \in V$, $(v^+)^+ = v$, $(\lambda v)^+ = \lambda^* v^+$), akkor ez kiterjeszthető az $(AB)^+ = B^+ A^+$, $(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$ szabályok alkalmazásával minden $A, B \in G$ -re is. Az ilyen involúcióval ellátott G -t involutív Grassman-algebrának nevezzük.

Ábrázoljuk a fermionállapotokat az egyrészcscsés állapotter, mint bázis-ter feletti Grassman-algebrán. Legyenek $\psi_i^+ |0\rangle$ az egyrészcscsés állapotter ortonormált bázisvektora, amelyet ψ_i^+ -tel jelölünk. Akkor az ábrázolás a következő

$$\hat{\psi}_i^+ \hat{\psi}_j^+ \dots \hat{\psi}_s^+ |0\rangle \rightarrow \psi_i^+ \psi_j^+ \dots \psi_s^+ \in G.$$

A $\hat{\psi}_i^+$ operátor a ψ_i^+ -vel való balról szorzással a $\hat{\psi}_i$ operátor pedig a ψ_i^+ szerinti baloldali deriválással ábrázolódik.

Tegyük ezt a Grassman-algebrát involutívra oly módon, hogy V -t megduplázzuk, minden eleméhez hozzáveszünk egy „adjungáltat”: $\psi_i^+ \rightarrow \psi_i$. Az így kapott Grassman-algebrát jelöljük \bar{G} -sal. \bar{G} -on bevezethető egy absztrakt integrál:

$$\int \mathcal{D}\psi^+ \mathcal{D}\psi = \prod_i \int d\psi_i^+ d\psi_i$$

$$\int d\psi_i^+ d\psi_i (f_{00} + f_{01} \psi_i + f_{10} \psi_i^+ + f_{11} \psi_i \psi_i^+) = f_{11}$$

legyenek f_{ij} -k akármilyen elemei is a \bar{G} -nak, ha ψ_i -t és ψ_i^+ -et nem tartalmaznak. Ezzel az integrállal az eredeti állapotteren vett skalárszorzat a következőképpen írható:

$$\langle f | g \rangle = \int \mathcal{D}\psi^+ \mathcal{D}\psi [f(\psi^+)]^+ g(\psi^+) e^{-\sum_i \psi_i^+ \psi_i},$$

ahol

$$|f\rangle = f(\hat{\psi}^+) |0\rangle \quad \text{és} \quad |g\rangle = g(\hat{\psi}^+) |0\rangle.$$

Az $f(\psi^+) \in G$ formálisan olyan, mint a ψ^+ változó funkcionálja. A bozontereknél bevezetett funkcionálreprezentáció és a tér diagonális állapotok közötti kapcsolat analógiájára konstruáljuk meg azokat a $|\psi\rangle$ állapotokat az állapotterben, amelyekkel $f(\psi^+)$ így írható:

$$f(\psi^+) = \langle \psi^+ | f \rangle.$$

Minthogy ez a skalárszorzat nem komplex szám, hanem G -nek eleme, ezért az állapotteret is ki kell terjeszteni úgy, hogy a részecskeszám reprezentáció bázisvektoraibanak G elemekkel képezett lineárkombinációit engedjük meg. Ekkor $|\chi\rangle$ meghatározható:

$$|\chi\rangle = e^{\sum_i \hat{\psi}_i^+ \chi_i} |0\rangle \quad \langle \chi^+ | = \langle 0 | e^{\sum_i \chi_i^+ \hat{\psi}_i}$$

$|\chi\rangle$ nem más, mint a $\hat{\psi}_i$ operátoroknak közös sajátállapota:

$$\hat{\psi}_i|\chi\rangle = \chi_i|\chi\rangle.$$

A $|\chi\rangle$ állapotok teljes rendszert alkotnak, de nem ortonormáltak: $\langle\vartheta^+|\chi\rangle = e^{\sum_i \vartheta_i^+ \chi_i}$ és az egységoperátor így írható:

$$\hat{I} = \int \mathcal{D}\chi^+ \mathcal{D}\chi \quad |\chi\rangle e^{-\sum_i \chi_i^+ \chi_i} \langle\chi^+|.$$

II. FÜGGELÉK

A hőmérséklet-függő futó csatolási állandó és a fizikai tömeg meghatározása

A (40) renormcsoport-egyenlet első két egyenlete a feltételezett szeparáció esetén 1-hurok közelítésben:

$$M \frac{\partial}{\partial M} \bar{g}(M, T) = -\left(\beta_0 + \frac{T^2}{M^2} \beta'_0\right) \bar{g}^3(M, T)$$

$$T \frac{\partial}{\partial T} \bar{g}(M, T) = \beta'_0 \frac{T^2}{M^2} \bar{g}^3(M, T).$$

A kezdőfeltétel: $\bar{g}(M_0, T_0) = g_0$. Vezessük be az $x = T/M$ változót T helyett: $\bar{g}(M, T) = G(M, x)$

$$M \frac{\partial}{\partial M} G(M, x) = -\beta_0 G^3(M, x)$$

$$x \frac{\partial}{\partial x} G(M, x) = \beta'_0 x^2 G^3(M, x).$$

Az első egyenletből:
$$\frac{1}{G^2(M, x)} = \frac{1}{G^2(x)} + 2\beta_0 \ln M/M_0.$$

A másodikból:
$$\frac{1}{G^2(x)} = C - \beta'_0 x^2.$$

A határfeltétel segítségével C meghatározható, s az eredmény a (44) futó csatolási állandó.

A hőmérséklet-függő tömegdimenziójú fizikai mennyiség általános alakja dimenzióanalízisből:

$$\mathcal{M}(T, \bar{g}(M_0, T_0), M_0, T_0) = T A(y, x_1, x_2),$$

ahol bevezettük az $x_1 = \frac{M_0}{T}$, $x_2 = \frac{T_0}{T}$ és az

$$y = \frac{1}{\bar{g}^2(M_0, T_0)} = C + 2\beta_0 \ln M_0 - \beta'_0 \frac{x_2^2}{x_1^2}$$

változókat. A két renormcsoporthoz egyenletet az A -val felírva:

$$\frac{\partial A}{\partial x_1} + T \frac{\partial y}{\partial M_0} \frac{\partial A}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial A}{\partial x_2} + T \frac{\partial y}{\partial T_0} \frac{\partial A}{\partial y} = 0.$$

Kis alakítások után:

$$\begin{aligned} x_1 \frac{\partial A}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial A}{\partial x_2} + 2\beta_0 \frac{\partial A}{\partial y} &= 0 \\ x_2 \frac{\partial A}{\partial x_2} - 2\beta'_0 \frac{x_2^2}{x_1^2} \frac{\partial A}{\partial y} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.1.})$$

Vezessük be az

$$s = \ln x_1$$

$$t = \ln x_2/x_1$$

$$u = y - 2\beta_0 \ln x_1 + \beta'_0 \frac{x_2^2}{x_1^2}$$

változókat. Ezekben a (II.1.) egyenletek: $\frac{\partial A}{\partial s} = \frac{\partial A}{\partial t} = 0$. Tehát

$$A(x_1, x_2, y) = F\left(y - 2\beta_0 \ln x_1 + \beta'_0 \frac{x_2^2}{x_1^2}\right)$$

F argumentumába a futó csatolási állandó (44) alakját írjuk a $_0$ indexet $_*$ -ra változtatva:

$$\mathcal{M} = TF \left(\frac{1}{g_*^2} + \beta_0 \ln \frac{M_0^2}{M_*^2} - \beta'_0 \left(\frac{T_0^2}{M_0^2} - \frac{T_*^2}{M_*^2} \right) - \beta_0 \ln \frac{M_0^2}{T^2} + \beta'_0 \frac{T_0^2}{M_0^2} \right) = TF \left(\beta_0 \ln \frac{T^2}{\Lambda^2} \right)$$

ahol bevezettük a $\Lambda = M_* \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta_0 g_*^2} - \frac{\beta'_0 T_*^2}{2\beta_0 M_*^2} \right\} \equiv \Lambda(M_*, T_*, g_*)$ függvényt, amely T -független megoldása az \mathcal{M} -re vonatkozó renormcsoporthoz tartozó egyenleteknek, amiről behelyettesítéssel meggyőződhetünk.

III. FÜGGELÉK

Az 1×1 -es $SU(2)$ -modell

Extrém esetként tekintsünk egy 2-dimenziós periodikus rácsot, amelynek 1 rácspontja van. Ehhez természetesen tartozik 2 önmagában záródó él és egy lap.



Az ezen definiált $SU(2)$ elmélet hatása:

$$S = \frac{4}{g^2} \left(1 - \frac{1}{2} \text{tr } U_1^\dagger U_0^\dagger U_1 U_0 \right)$$

Ebben a modellben is megvannak a nem mérték-ekvivalens vákuumok:

$$V_\mu(\alpha) = e^{i\alpha\mu\frac{\sigma_3}{2}} \quad -2\pi < \alpha_\mu \leq 2\pi \quad \mu = 0, 1$$

Az időarányú Wilson-hurok: $W = \text{tr } U_0$ a vákuumban $W = \text{tr } V_0(\alpha) = 2 \cos \frac{\alpha_0}{2}$. Írjuk fel az állapotösszeget az $U_0 = a_0 + ia_0\sigma$, $U_1 = b_0 + ib_0\sigma$ koordinátákban:

$$Z = \int \frac{d^4 a}{2\pi^2} \delta(a^2 - 1) \int \frac{d^4 b}{2\pi^2} \delta(b^2 - 1) \exp \left\{ -\frac{8}{g^2} [a^2 b^2 - (ab)^2] \right\}$$

Legyen $\varrho(a_0)da_0$ annak a valószínűsége, hogy W $2a_0$ és $2(a_0 + da_0)$ közé esik:

$$\varrho(a_0) = \frac{1}{Z} \int \frac{d^3 \mathbf{a}}{2\pi^2} \delta(\mathbf{a}^2 + a_0^2 - 1) \int \frac{d^4 b}{2\pi^2} \delta(b^2 - 1) e^{-\frac{8}{g^2} [a^2 b^2 - (ab)^2]}$$

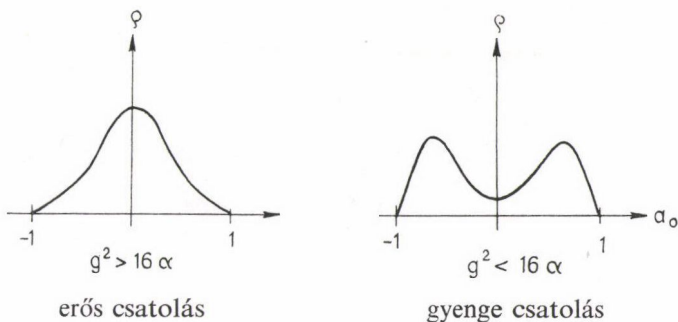
Akkor nyilván $\langle W \rangle = \int_{-1}^1 da_0 2a_0 \varrho(a_0)$. Néhány átalakítás után:

$$\varrho(a_0) = \frac{1}{Z} \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{1 - a_0^2} \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy \sqrt{1 - y^2} e^{-\frac{8x}{g^2} (1 - a_0^2)(1 - y^2)}$$

$\varrho(a_0)$ kvalitatív viselkedésének meghatározása végett közelítsük ezt az integrált a következőképpen:

$$\varrho(a_0) \approx C \sqrt{1 - a_0^2} e^{-\frac{8x}{g^2} (1 - a_0^2)},$$

ahol α numerikus értéke meghatározandó. Ez a függvény $g^2 > 16\alpha$ esetén az origó körül koncentrált, $g^2 < 16\alpha$ esetén viszont 2 maximuma van $a_0 = \pm \sqrt{1 - g^2/16\alpha}$ -nál.



$g^2 = 16\alpha$ -nál tehát egy dinamikai szimmetriasérülésnek vagyunk szemtanúi, amelyben az $U_0 \rightarrow -U_0$ diszkrét szimmetria sérül.

IRODALOM

1. M. B. Kislinger, P. D. Morley, Phys. Rev. D13, 2771, 1976.
2. A. M. Polyakov, Phys. Lett. 72B, 477, 1978.
3. L. Susskind, Phys. Rev. D20, 2610, 1979.
4. J. Kuti, J. Polónyi, K. Szlachányi, KFKI—1980—67 preprint.
5. L. D. McLerran, B. Svetitsky, SLAC—PUB—2572 preprint, 1980.
6. A. D. Linde, Rep. Prog. Phys. 42, 389, 1979.
7. D. J. Gross, R. D. Pisarski, L. G. Yaffe, Princeton preprint.
8. J. Kuti, B. Lukács, J. Polónyi, K. Szlachányi, Phys. Lett. 95B, 75, 1980.
9. C. N. Yang, R. L. Mills, Phys. Rev. 96, 191, 1954.
10. P. A. M. Dirac, Principles of Quantum Mechanics, Oxford, 1958.
11. R. P. Feynman, A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and path integrals, New York etc. McGraw Hill 1965.
12. K. G. Wilson, Phys. Rev. D10, 2445, 1974.
13. D. J. Gross, F. Wilczek, Phys. Rev. D8, 3633, 1973.
14. L. D. Fadeev, V. N. Popov, Phys. Lett. 25B, 30, 1967.
15. V. N. Gribov, Nucl. Phys. B139, 1, 1978.
16. O. K. Kalashnikov, V. V. Klimov, Lebedev Phys. Inst. preprint.
17. J. I. Kapusta, Nucl. Phys. B148, 461, 1979.
18. B. A. Freeman, L. D. McLerran, Phys. Rev. D16, 1130, 1147, 1169, 1977.
19. M. Dine, doktori disszertáció, Yale University (1978).
20. D. J. Gross, előadás az 1976-os Les Houches-i iskolán.
21. W. Celmaster, R. J. Gonsalves, Phys. Rev. D20, 1420, 1979.
22. E. S. Fradkin, Trudy Lebedev Phys. Inst. 29 7, 1965.
23. П. С. Александров, Введение в гомологическую теорию размерности и общую комбинаторную топологию, Наука, 1975
24. H. Joos, Lectures given at the XVIII. Internationale Universitätswochen für Kernphysik, Schladming.
25. J. D. Walecka, Annals of Physics, 83, 491, 1974.
26. P. Hasenfratz, R. R. Horgan, J. Kuti, J. M. Richard, TH. 2837 — CERN preprint.
27. K. Binder, in Phase Transitions and Critical Phenomena, edited by C. Domb and M. S. Green. Academic, New York, 1976, Vol. 5B.
28. A. Hasenfratz, P. Hasenfratz, TH. 2827 — CERN preprint.
29. M. Creutz, Phys. Rev. D21, 2308, 1980.
30. M. Creutz, Proceedings of the Johns Hopkins workshop, 1980. 85. p.

KÖNYVISMERTETÉS

H. L. Swinney and J. P. Gollub (editors): *Hydrodynamic instabilities and the Transition to Turbulence. Topics in Applied Physics, Volume 45.*
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981.

„A turbulencia megfelelő értelmezése a legutóbbi évekig hiányzott, és így a turbulencia beindulását sem lehetett értelmezni” — írja H. L. Swinney és J. P. Gollub a kötet első, bevezető fejezetében. A közelmúltig turbulensnek mondtuk az áramlást, ha az áramló közeg fényképén szignifikáns „rendezetlenség” volt megállapítható. Ilyen módon aztán turbulensnek neveztük az olyan komplex struktúrájú áramlást is, amelyikben — bonyolultsága ellenére — nagyfokú rendezettség uralkodik.

A mérés- és a számitástechnika fejlődése révén az áramlás dinamikai paramétereire és e paraméterek Fourier-spektrumára vonatkozó ismereteink gyors ütemben kibővültek. A Fourier-spektrum analízise alkalmas módszernek látszik a hidrodinamikai áramlások kvalitatív osztályozására. Nevezetesen: a spektrumban a diszkrét csúcsnak és felharmonikusainak a fellépte azt jelzi, hogy az áramlásban periodikus oszcillációk vannak jelen; ha a spektrumban a csúcsok frekvenciái inkommensurábilisek, akkor az áramlást kváziperiodikusnak nevezzük olyan értelemben, hogy elég hosszú (de véges) idő alatt az áramlás dinamikai paraméterei egy korábbi értékekhez közel kerülnek; ha végül a spektrum sávos szerkezetű (ill. zajszerű), akkor az áramlás nem periodikus; a turbulencia beindulásának legmegfelelőbb definíciója a non-periodicitás fellépte.

A nem-lineáris differenciálegyenletek ún. kvalitatív elmélete új és stimuláló szempontokat adott a turbulencia elméletében is. Az egyik legfontosabb megállapítás az, hogy csatolt, nem-lineáris, elsőrendű — de viszonylag egyszerű struktúrájú — differenciálegyenlet-rendszernek kaotikus megoldásai lehetnek. Ezek a megoldások (gyakran speciális attraktoroknak nevezik őket) sokkal irregulárisabbak, mint a determinisztikus egyenletek megoldásairól ezt korábban gondoltuk. A könyv második fejezetének a tárgya az ilyen dinamikai rendszerek matematikai leírása. A fejezet szerzője, O. E. Lanford részletesen elemzi azt a hipotézist, amely szerint a turbulencia speciális (strange) attraktor-nak tekinthető.

A hidrodinamikai stabilitás problémájának másik megközelítése az ún. bifurkáció-elmélet: nem-lineáris differenciál-egyenlet-rendszerek megoldásainak a felhasadása, elágazása. Ez a témája a kötet harmadik fejezetének; szerzője D. D. Joseph.

A második fejezetben taglalt „kaotikus” megoldások témakörét bővíti ki és mélyíti el J. A. Yorke és E. D. Yorke a kötet negyedik fejezetében. A szerzők szerint „egyes egyszerű dinamikai rendszereknek olyan szabálytalan, kaotikus tulajdonságai vannak, amelyek nagymértékben emlékeztetnek a turbulenciára. Ennek a kaotikus viselkedésnek a kulcsa a nagyfokú érzékenység a kezdeti feltételekre.” Ezt a megfontolást érdekes példákkal illusztrálják a fejezet szerzői.

A hidrodinamikai instabilitás és a turbulencia vizsgálata kezdetben néhány, viszonylag egyszerű áramlásra koncentrált: Rayleigh—Bénard-féle konvekció, áramlás forgó, koaxiális hengerek között, párhuzamos, réteges (nyíró) áramlás. Ezeknek az áramlásoknak az instabilitásaival foglalkozik a könyv 5—7. fejezete. Szerzők: F. H. Busse; R. C. DiPrima és H. L. Swinney; S. A. Maslowe.

A turbulencia és az instabilitások fontos szerepet játszanak a műszaki gyakorlatban, az oceanográfiában, a légköri jelenségekben, az asztrofizikában is. A nyolcadik fejezet témája főleg a meteorológiában és a légköri folyamatokban fontos nyíró áramlások instabilitásaival foglalkozik. Szerzők: D. J. Tritton és P. A. Davies.

A nem-newtoni folyóanyagok áramlásának „kaotikus dinamikája” az utolsó, kilencedik fejezet tárgya. Szerzője J. M. Guckenheimer. A fejezet címe: Instabilitások és káosz nem-newtoni rendsze-

rekben. A témát a szerző néhány speciális áramlás instabilitásainak a vizsgálatával fejti ki (pl. a földmágnesség dinamo-modellje, a Bjeluszov—Zsobotinszkij-féle kémiai reakció).

Összefoglalva: a könyv a téma kiemelkedő szakembereinek kiváló munkája. A szerkesztők az előszóban a következőket írják: „Bár a könyv szigorúan véve nem bevezető jellegű, a szerzők arra törekedtek, hogy jól használhassák azok a fizikusok, matematikusok, mérnökök és felsőéves egyetemi hallgatók is, akik nem specialistái a hidrodinamikának és a matematikai alkalmazásoknak”. A recenzens véleménye szerint törekvésüket teljes siker koronázta.

Szabó János

A. Ben-Shaul, Y. Haas, K. L. Kompa, R. D. Levine: Lasers and chemical change

Számos olyan könyv látott napvilágot az utolsó években, amelyek a lézerek kémiai alkalmazásaival vagy kémiai reakciókban felszabaduló energia lézerek pumpálására való felhasználásaival foglalkoznak.

A Springer Verlag a Chemical Physics sorozatában megjelent kötetben azt a feladatot tűzte ki, hogy egységes formában tárgyalja a lézerek és kémiai változások lehetséges kapcsolatainak összes vonásait. A vizsgált jelenség a lézersugárzás energiájának és a kémiai energiának egymásba való átalakulása, amely egyrészt jelentheti exoenergikus kémiai reakciók felhasználását lézersugárzás generálására, másrészt lézersugárzás alkalmazását kémiai reakciók indukálására, ill. leállítására. A folyamatokban részt vevő molekulák és sugárzási tér által alkotott rendszer távol van egyensúlyi helyzetétől.

Az első fejezet e két széles jelenségcsoport megértéséhez szükséges legfontosabb alapismeretek összefoglalása. Erre épül a második és harmadik fejezet, amelyek e folyamatok elméleti alapjait tartalmazzák. A negyedik fejezet a kémiai lézerek leírásával foglalkozik beleértve bizonyos alkalmazásait. Végül az ötödik fejezet a lézerek kémiai alkalmazásainak elvi alapját foglalja össze.

A könyv nemcsak a témával megismerkedni akaró, hanem a hasonló területen dolgozó szakembereknek is hasznos ismereteket nyújt akár a lézerek, akár a kémia oldaláról kívánják azt megközelíteni.

A rangos nemzetközi szerzőgárda magas színvonalon foglalta össze e rendkívül gyorsan fejlődő terület legfontosabb tudnivalóit, amely így hézagpótlónak tekinthető e fontos és perspektivikus tudományterület irodalmában.

Króó Norbert

W. O. N. Guimaraes, C.-T. Lin A. Mooradian (ed.-s): Lasers and applications

Világszerte növekszik azoknak a konferenciáknak, szimpoziumoknak a száma amelyek lézerekkel és azok alkalmazásaival foglalkoznak. Ezek között is érdekes helyet foglal el az a brazil konferencia, amelyet P. Porto, a lézerspektroszkópia egyik úttörője, brazil fizikus emlékének szenteltek.

A Springer Verlag optikai sorozatában megjelentette e konferencia előadásainak anyagát. A tematika széles, az új lézer eszközöktől és azok alkalmazásaitól a Raman spektroszkópián, nagyfelbontású lézer spektroszkópián, a lézer fotokémián és optikai adatátvitelen keresztül a nemlineáris optikáig és a lézerek orvosi-biológiai alkalmazásáig a lézeral alkalmazások változatos területét öleli fel. Nem törekszik egységes képet adni a tárgyalt témakörökben, hanem a részt vevő előadók érdeklődési körének megfelelő egy-egy probléma ismertetésére és elért eredményeiknek publikálására szorítkozik.

A kötet érdekes olvasmány a területen többé-kevésbé jártas kutató számára és ugyanakkor néhány hasznos információ forrása is.

Króó Norbert

**D. C. Brown: High—Peak—Power Nd:Glass Laser Sytems Optical Sciences 25. kötet;
Springer, 1981**

Nagy csúcsteljesítményű Neodimium-üveg lézerrendszerek

Nagyon vegyes érzésekkel veheti kezébe a magyar és általában a „kis országok” olvasója D. C. Brown könyvét. Számunkra elérhetetlen mesevilág a világon csak néhány ország kutatói számára rendelkezésre álló hatalmas lézerrendszerek birodalma. (A kisebbek úgy 10 millió dollár körül kezdődnek.) Ezek a „lézerházak” a lézeres magfúziós és — valljuk be — a haditechnikai kutatásoknak is fellegvárai. Azok a nagygépek, amelyekkel a legszebb nemlineáris optikai és röntgenlézerek kutatásokat el lehet végezni.

A szerző saját bevallása szerint azért írta meg könyvét, mert az ilyen lézerrendszerekre vonatkozó adatok nagy része csak belső kutatási eredmények formájában került nyilvánosságra. Már ami került, hisz érthető okokból, sokminden nem került.

Ez viszont világosan látszik a könyvön is. A szerző ugyanis összegyűjtött mindent amit úgy kellene összekeresgetni más-más könyvekben cikkekben. Rengeteg hasznos és haszontalan információt tudhatunk meg az Nd:üvegekről, optikai és mechanikai tulajdonságairól, roncsolási küszöbeiről. Szép gyűjteménye és illusztrációja a téma annak, hogy az igencsak elvontnak látszó nemlineáris optikai jelenségek milyen komoly gyakorlati jelentőséggel bírnak a nagyteljesítményű lézerek tervezésénél és működtetésénél.

Mindezek ellenére nem ajánlom, hogy valaki is, csak ezen könyv alapján nekiálljon Nd:üveg lézerrendszereket tervezni, mert a lényeges dolgok hiányoznak a könyvből, s az ennek alapján tervezett lézer nem nagyon fog működni.

Ha a könyvet úgy fogjuk fel, mint „engedélyezetten kiragadott szemelvények egy Nd:lézer tervező tanulmányaiból”, akkor kevésbé fogunk csalódni.

Horváth Zoltán György

**J. Bernasconi and T. Schneider (editors): Physics in One Dimension
Springer Series in Solid-State Sciences 23, Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1981**

Az egydimenziós modellek régóta használatosak a fizikában, elsősorban azért, mert sok modell könnyebben oldható meg egy térbeli dimenzióban, mint háromdimenziós térben, sőt sok esetben egzakta megoldás található, szemben a háromdimenziós közelítő eredménnyel. Hosszú ideig az egydimenziós modellek csak matematikai modellek voltak a fizikusok számára, hogy a háromdimenziós világot jobban megérthessék.

Az utóbbi, mintegy tíz évben gyökeresen megváltozott ez a szemlélet. Egyrészt kiderült, hogy nagy számban találhatók olyan, extrém módon anizotrop anyagok, melyek különböző tulajdonságait illetően, pl. mágneses, mechanikai, elektromos vezetési, stb. szempontból egydimenziósnak tekinthetők. Másrészt az elméleti vizsgálatok feltárták, hogy dimenzionalitási effektusok lényegesek lehetnek és egy egydimenziós modell tulajdonságai lényegesen eltérhetnek a megfelelő háromdimenziós modellétől.

A fentiek magyarázzák, hogy az utóbbi időben szinte évente rendeznek nemzetközi konferenciát az alacsony-dimenziós rendszerekről. Az ismertetendő kötet az 1980-ban a svájci Fribourgbán megrendezett nemzetközi konferencia meghívott előadóinak előadásait és néhány rövidebb előadást tartalmaz.

A bevezető előadásban D. C. Mattis, az egydimenziós matematikai fizika egyik vezéralakja arról beszélt, hogyan lehet a Lánczos-féle tridiagonalizálási eljárással szinte minden problémát egy egydimenziós lánc problémájára visszavezetni. A további előadások öt nagy csoportba sorolhatók:

1. szolitonok
2. mágneses láncok
3. polimérek
4. kvázi-egydimenziós vezetők
5. rendezetlenség és lokalizáció.

A szolitonok speciális egydimenziós modellek topológikus gerjesztései. Matematikailag szigorúan megmutatható jelenlétük, az igazi probléma azonban a termodinamikai viselkedésben játszott szerepük. A mágneses modellek és a polimérek tárgyalásánál is sokszor kerültek elő a szolitonok, mint a rendszer sztatikáját és dinamikáját lényegesen befolyásoló gerjesztések. A polimérek fejezet

szinte kizárólag a poliacetilénnel foglalkozik, hiszen ez az utóbbi időben rendkívül intenzíven vizsgált anyaggá vált. Viszonylag kevés előadásban volt szó az anyagok egy sokkal szélesebb osztályáról, a kváziegydimenziós vezetőkről. Itt hangsúlyt kapott az ilyen anyagokban megfigyelt szupravezetés. Végül a rendezetlenség és lokalizáció téma kapcsán megint speciális dimenzionalitási effektusokról volt szó, hiszen mind a rendezetlenség hatása, mind a lokalizáció megjelenése más egydimenziós rendszerekben, mint háromdimenziósokban.

Az egydimenziós fizikával foglalkozó kutatók itthon is szép számú tábora jó összefoglalását találja a téma jelenlegi állásának.

Sólyom Jenő

**W. A. Phillips (ed.): Amorphous Solids, Low — Temperature Properties
Topics in Current Physics 24
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York 1981**

A szilárdtest-fizikai vizsgálatokban az utóbbi időben egyre nagyobb szerepet kapnak a rendezetlen, amorf, vagy üveges szerkezetű anyagok. Az elmúlt tíz év egyik nagy meglepetése volt, hogy alacsony hőmérsékleten, 1 K táján, az amorf anyagok a kristályosokétól lényegesen eltérő tulajdonságokkal rendelkeznek. Az alacsony hőmérsékleti fajhő, pl. lineárisan változik a hőmérséklettel szigetelő üvegekben is, szemben a szokásos, fononoktól eredő T^3 -ös járulékkal. Ezt csak újfajta gerjesztések jelenlétével lehetett értelmezni. Az alagutazó állapotok, vagy a rendetlenséget leíró kétnívós rendszerek feltételezésével már a kísérletekkel egyező leírást lehetett adni. Így ezek az állapotok az amorf anyagok tárgyalásánál alapvető szerepet játszanak.

Az „Amorphous Solids” c. könyv az amorf anyagok alacsony hőmérsékleti viselkedésének tisztázására irányuló kutatás eredményeit mutatja be, úgy ahogy az 1979 végén állott. Az első két fejezetben W. A. Phillips és D. L. Weaire a szigetelő üvegek két legfontosabb gerjesztését, a kétnívós rendszereket és a fononokat vezetik be, illetve a spektrumra vonatkozó számításokat ismertetik.

Ezután R. O. Pohl, W. A. Phillips és A. C. Anderson a termodinamikai tulajdonságokkal, a fajhővel, a hőtágulással és a hővezetőképességgel kapcsolatos eredményeket foglalják össze, mind kísérleti, mind pedig elméleti szempontból, megmutatva milyen módon következtethetünk az egyes gerjesztések járulékaira.

Végül S. Hunklinger és M. V. Schickfus, B. Golding és J. E. Graebner, illetve J. Jäckle az akusztikus és dielektromos tulajdonságokat, a relaxációs jelenségeket, illetve az alacsony frekvenciájú Raman szórást elemzik.

A szerzők nevét olvasva rögtön kitűnik, hogy az adott terület valóban legismertebb kutatói írták az összefoglalókat, s így valóban első kézből kaphatunk információt erről a fellendülőben levő területről. Az ismertetés írója hiányosságként talán azt érzi, hogy az amorf fémek speciális tulajdonságairól szinte említés sincs a könyvben, s mindössze egy rövid utalás van arra vonatkozóan, hogy a kétnívós rendszer a vezetési elektronokkal is kölcsönhat, s ez a relaxációs folyamatokat lényegesen megváltoztathatja.

Ennek ellenére az amorf anyagokkal foglalkozó kutatók hasznos kézikönyvként forgathatják ezt a kötetet.

Sólyom Jenő

**F. Yonezawa (ed.): Fundamental Physics of Amorphous Semiconductors
Springer Series in Solid-State Sciences 25
Springer-Verlag Berlin—Heidelberg—New York 1981**

Néhány év óta a Kyoto-i Egyetem „Kyoto Summer Institute” néven rövid nyári iskolát szervez, elsősorban japán résztvevőknek, de nemzetközi előadógárdával. Egy a részecske fizikával, illetve az alacsonydimenziós rendszerekkel foglalkozó iskola után 1980-ban az amorf félvezetők fizikájáról szóltak az előadások. A kötet a meghívott előadások anyagát tartalmazza.

A bevezető előadásban H. Fritzsche az üvegszerű és az amorf állapot különbözőségéről, a nem-kristályos anyagok általános jellemzőiről és osztályozásukról beszélt. Ezután D. Adler, J. Salamon, W. E. Spear, P. G. Le Comber, M. H. Brodsky, W. Paul és G. Lucovsky különböző szempontok szerint, de mind az amorf félvezetők szennyező állapotaival, elsősorban a hidrogénszennyezés szerepével foglalkoztak. A hidrogén, a lokális kötési viszonyokat megváltoztatva, módosítja a mozgékonyági gap-en belül az állapotsűrűséget, s ezzel a transzporttulajdonságokat és az optikai tulajdonságokat is.

K. Tanaka előadásában azt mutatta meg, hogy az amorf szerkezet milyen speciális foto-indukált jelenségekre vezet, elsősorban a reverzibilis fotosötétedést, az abszorpció és eltolódás tárgyvalva. A hangsúly itt a kísérleti eredmények bemutatásán volt, mert a mechanizmus még nem tisztázott elméletileg.

Ezután F. Yonezawa és M. H. Cohen az amorf félvezetők elektronszerkezetének elméletéről tartottak előadást. Ez a kötet egyik legjobb fejezete, sorra analizálják a különböző típusú rendezetlenségeket, mint az összetételbeli, struktuális és topologikus rendezetlenség és egyszerű modelleken megmutatják ezek hatását az elektronszerkezetre.

V. L. Bonch—Bruevich az elektron-elmélet néhány speciális problémájával, a rendezetlenség okozta lokalizációval foglalkozott. Ugyanezt a problémát, az Anderson-féle lokalizációt vizsgálta D. Weaire előadásában. A sajnálatosan rövid fejezet csak jelezni tudja a probléma kiterjedtségét és a megoldására irányuló próbálkozásokat.

Végül H. Kawamura összefoglalójában az amorf félvezetők fizikájának megoldatlan problémáira mutat rá és kifejezte azt a meggyőződését, hogy az elkövetkező évtizedekben ez a terület lesz a szilárdtestfizikai kutatások egyik központi témája.

Sólyom Jenő

**C. Kuncz (ed.): Synchrotron Radiation. Techniques and Applications
Topics in Current Physics
Springer—Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1979**

A szinkrotronok és a szinkrotron sugárzás ma egyre inkább az érdeklődés előterébe kerül, egyre több tudományág érdeklődik iránta, az alkalmazásával végzendő sokirányú, interdiszciplináris kutatásokra a világ különböző tájain külön programok szerveződnek és a megfelelő szakirodalom — túlzás nélkül — szinte robbanásszerűen nő.

Ez érthető, ha meggondoljuk, hogy a szinkrotronban keringő elektronoktól (esetleg pozitronoktól) eredő ún. szinkrotron sugárzás milyen különleges és előnyös tulajdonságokkal rendelkezik. Ezek: 1. folytonos spektrum az infravöröstől a röntgentartományig, 2. erősen kollimált sugárzás, 3. lineáris és cirkuláris polarizáltság, 4. 100 psec-ig terjedő hosszúságú sugárzási impulzusok, 5. a forrás tulajdonságainak kézmentarthatósága (számításokkal), 6. a forrás tisztasága, mivel a sugár-emisszió igen magas vákuumban történik.

Ugyanakkor — éppen a terület rendkívül gyors növekedése miatt — gyakorlatilag hiányoznak a szinkrotron sugárzással, ill. annak alkalmazásával kapcsolatos könyvek, monográfiák. Ezt a hiányt igyekszik pótolni a Springer Kiadó „Topics in Current Physics” sorozatában megjelent Szinkrotron sugárzás című kötete, amelyet egy szerző kollektíva írt (általában egy-egy szerző a hét fejezet egyikét) és C. Kuncz (egyben az első fejezet szerzője) szerkesztett.

A fejezetek közül az első három a szinkrotron sugárzással magával, illetve előállításával és a megfelelő instrumentális technikával foglalkozik. Az utolsó három a legfontosabb alkalmazási területeket tárgyalja: az atomi, a molekula- és a szilárdtest-spektroszkópiát. Az előbb említett három és az utóbbi három fejezet között egy az elméletnek, pontosabban a belső héjakra vonatkozó spektroszkópia elméleti aspektusainak van szentelve. Az olvasónak bizonyos hiányérzete van a biológiai alkalmazásokkal kapcsolatban, amelyek éppen csak meg vannak említve egyik vagy másik fejezetben.

A könyvben (különösen a 3. fejezetben) számos érdekes és hasznos táblázat található, így pl. a világban jelenleg működő szinkrotronokról és legfontosabb adataikról, az ultraibolya és röntgen-detektorok típusairól és legfontosabb tulajdonságaikról, a szinkrotronnal előállított ultraibolya- és röntgen-sugárzással végezhető kísérletekről stb. A könyvet hasznos tárgymutató zárja.

Berényi Dénes

**P. Goodman (ed.): Fifty Years of Electron Diffraction
D. Reidel Publishing Co., 1981**

„Az elektrondiffrakció 50 éves története” tudománytörténeti adatokban gazdag, jól szerkesztett könyv, amely a néhány évvel ezelőtt a röntgendiffrakció történetéről megjelent kötethez hasonlóan nagy sikerre számíthat. A röntge diffrakció árnyékában induló elektrondiffrakció a maga sajátos lehetőségeivel ma az anyagszerkezeti kutatások bizonyos területeinek nélkülözhetetlen módszere. A szerkesztő az elektrondiffrakció kezdetét, fejlődését, alkalmazási területeit visszaemlékezések formá-

jában, személyekhez vagy iskolákhoz kapcsolódóan állította össze. A könyvnek ezen tárgyalásmódja miatt a történeti fejlődés időben nem folyamatos. Ez azonban nem válik a könyv hátrányára elsősorban azért, mivel a nemzetközileg ismert neves szerzők közvetlen stílusa, kritikai szemléletmódjuk miatt a könyv igen olvasmányos. Az elektrondiffrakció története jól példázza a tudomány fejlődésére általában jellemző tényeket: a nemzetköziséget, a személyes kapcsolatok szerepét, az elmélet és kísérlet kölcsönhatását. Érzékelhető az az állhatatos és szívós, esetenként eredmény nélküli munka is ami a tudományos munka természetes velejárója, az egyik szerző szavaival: ...laboratóriumok születése és halála. Áttekintést kapunk a különböző elektrondiffrakciós módszerekről mind elméleti mind kísérleti vonatkozásban. A legnagyobb terjedelemmel a szilárd testek vizsgálatára alkalmazható módszerek szerepelnek. A könyvnek mintegy harmad részében a modern molekulaszervezet-kutatásban jelentős szerepet játszó gázelektrondiffrakciós vizsgálatok ismerhetők meg. Számos fénykép, vázlat és esztétikailag is szép elektrondiffrakciós felvétel illusztrálja a feldolgozott témát. Az érdeklődőknek irodalomjegyzékek nyújthatnak segítséget. A könyv nemcsak a szűkebb tudományág, hanem ennél jóval szélesebb körben számíthat sikerre. Hazánkban a 440 oldalas könyv feltehetően csak kevés ember számára lesz eredetiben hozzáférhető. A reális igények figyelembevételével a könyv magyar nyelvre történő fordítása célszerű, ajánlatos lenne.

Tremmel János

**Peter Day (editor): „Emission and Scattering Techniques”
D. Reidel Publishing Company 1981**

A hatvanas évek végétől kezdve rohamléptekben fejlődő emissziós és diffrakciós módszerek a szerves kémiai és szilárdtestfizikai kutatások alapvető eszközeivé váltak. A kísérleti technika finomodásával és az elméleti háttér tisztázásával manapság ezek a módszerek egyaránt alkalmasak az iparban felvetődő különböző partikuláris problémák közvetlen megoldására, illetve az átfogó elméleti kutatás kiinduló, illetve ellenőrző tényanyagának szolgáltatására. Ugyanakkor a magasszintű kísérleti technika és a kiértékeléshez szükséges bonyolult elméleti apparátus ezeket a módszereket külön-külön is szinte önálló tudományággá tette, mintegy elkülönítve a módszerek fejlesztőit a lehetséges alkalmazóktól. Pedig a folyamatos fejlődés, az egyes módszerek újabb és újabb lehetőségeinek felfedezése, különböző aspektusok előtérbe kerülése egyre jobban bővíti a lehetséges felhasználók körét.

A Forlani és Day professzorok által szervezett háromévenkénti találkozók célja éppen a kísérleti módszereknek és újabb lehetőségeiknek a felhasználókkal való megismertetése volt. Az „Emission and Scattering Techniques. Studies of Inorganic Molecules, Solids, and Surfaces” című kötet a negyedik ilyen találkozó előadásait tartalmazza. A találkozót a NATO Advanced Study Institute sorozat keretében 1980-ban rendezték meg; a könyv a D. Reidel Publishing Company gondozásában jelent meg 1981-ben.

A tizenöt előadás többsége emissziós módszerekkel kapcsolatos. A diffrakciós technikát a felületfizikai alkalmazás szempontjából fontos módszerek (LEED, RBS, neutrondiffrakció adszorbeált rétegekről) képviselik.

A kitűzött célnak megfelelően az egyes előadások bevezető, illetve összefoglaló jellegűek: tartalmazzák a különböző módszerek elvének leírását, a kiértékeléshez szükséges elmélet rövid ismertetését, az elvi kísérleti elrendezést, valamint esetenként a módszer kivitelezésének gyakorlati problémáit és technikai részleteit is, majd néhány szemléltető példán mutatják be a módszerek alkalmazását.

P.A. Cox, illetve G. Wiech közleményei — előbbi az UPS, utóbbi az XES módszerrel történő vegyértéksáv meghatározásról — ennél többet nyújtanak: széles áttekintését adják a különböző típusú anyagokon eddig elért eredményeknek; ennél fogva ezek kiválóan használhatók adatgyűjteményként is.

A kötet szerkesztésének elvei nem következetesek. Kétségtelen problémát jelent, hogy az ismertetett módszerek többféleképpen (pl. mérési elv, ill. vizsgált rendszerek szerint) csoportosíthatók. A lehetséges csoportosítások közül a könyvben egyik sem valósul meg következetesen. A felületi elektronállapotokra vonatkozó elméleti bevezető utána a szilárdtestek tömbbeli elektronszerkezetének vizsgálatával foglalkozó cikkek következnek, sorrendben a vegyértéksáv mérése UPS módszerrel, illetve a törzsnívók energiájának meghatározása XPS-sel. Ezután a felületi krisztallográfiában alkalmazható szögfelbontásos XPS ismertetése következik, majd az XES alkalmazása ismét csak a tömbbeli vegyértéksáv kimérésére. A következő cikk a fékezési sugárzás betöltetlen állapotok meghatározására való felhasználásával foglalkozik. A hetedik cikk molekulák és szilárdtestek lokális szennyezéseinek lumineszcencia vizsgálatával kapcsolatos. A továbbiakban a szilárdtest felületek struktúrájának és összetételének vizsgálata következik, sorrendben LEED, EXAFS, neutrondiffrakciós és

MAHAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

részecskeindukált röntgenemisszióval kombinált RBS módszerekkel, illetve az XPS felületfizikai alkalmazásával. Ezt a sorozatot azonban megszakítja két molekulákra vonatkozó cikk. Az egyik az elektronállapotok energiájának és szimmetriájának (e , $2e$) módszerrel történő meghatározásával, a másik a gázreakciók XPS vizsgálatával foglalkozik. Végül a kötet az Auger spektroszkópia és az XPS összehasonlításával zárul.

A könyvben foglalt cikkek kifejezetten „up to date” szintűek, a hivatkozások nagy része 1973—1980 között megjelent művekre vonatkozik. Kifejezetten újdonság az amorf anyagok fotoelektron spektruma, az anizotrop röntgenemisszió és az XPS felületfizikai alkalmazásának egyes aspektusai. A fontossághoz képest talán kisebb súllyal szerepel az Auger spektroszkópia. A kötet fő profilja — az RBS-től eltekintve — az elektronállapotok és az azokból a szerkezetre levonható információk vizsgálata. Az egyes cikkek külön-külön rendkívül hasznosak az érdeklődő felhasználók, illetve a módszerekkel megismerkedni kívánó kezdők számára.

Dr. Giber János

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat nyomdába érkezett: 1981. március 15. — Terjedelem: 7,7 (A/5 ív)
82-3983 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató

TARTALOM

Angster Judit—Miklós András—Tarnóczy Tamás: A zengőszobai mérések általános problémái	287
Szlachányi Kornél: A kvark-gluon anyag termodinamikája	311

KÖNYVISMERTETÉS

H. L. Swinney and J. P. Gollub (editors): Hydrodynamics Instabilities and the Transition to Turbulence	365
A. Ben-Shaul, Y. Haas, K. L. Kompa, R. D. Levine: Lasers and Chemical Change	366
W. O. N. Guimaraes, C.-T. Lin A. Mooradian (ed.-s): Lasers and Applications	366
D. C. Brown: High-Peak—Power Nd: Glass Laser Systems	367
J. Bernasconi and T. Schneider (ed.-s): Physics in one Dimension	367
W. A. Phillips (ed.): Amorphous Solids. Low-Temperature Properties	368
F. Yonezawa: Fundamental Physics of Amorphous Semiconductors	368
C. Kuncz (ed.): Synchrotron Radiation. Techniques and Applications	369
P. Goodman (ed.): Fifty Years of Electron Diffraction	369
Peter Day (editor): Emission and Scattering Techniques	370

307.226

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

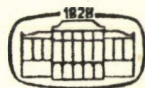
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

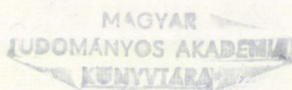
HŐKEZELÉS HATÁSA A FÉMEK HIBASZERKEZETÉRE*

Szerkesztette:
KOVÁCS ISTVÁN

Jelen cikkgyűjtemény a fémekben hőkezelések során fellépő hibaszerkezet változásokról kíván összefoglaló áttekintést adni a jelenlegi irodalmi eredmények alapján. A cikkgyűjtemény alapját az ELTE Általános Fizika Tan.zékének 1980. januárjában tartott 4 napos szemináriumának anyaga képezi.

* Érkezett 1981. febr. 16.

1 Fizikai Folyóirat 82/5



TARTALOM

1. Hibaeltűnési folyamatok fémekben	375
2. Ponthibaeltűnés befagyasztott fémekből	379
3. Megújulási folyamatok besugárzott fémekben	403
4. Ponthiba eltűnési folyamatok alakított fémekben	417
5. Deformációs tárolt energia	435
6. Megújulási folyamatok fémekben	447
7. A rekrisztallizáció hajtó és fékező erői	501
8. Primer rekrisztallizáció	513
9. Kismennyiségű adalékok hatása a megújulásra és rekrisztallizációra	527
10. Kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációja	537
11. Nagyszögű szemcsehatárok mozgása	549
12. Szekunder rekrisztallizáció	561
13. Dinamikus megújulás és rekrisztallizáció	575

1. HIBAELTŰNÉSI FOLYAMATOK FÉMEKBEN

KOVÁCS ISTVÁN
ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	375
2. Nemegyensúlyi kristályhibák keletkezése	375
3. A hibaeltűnési folyamatok aktiválási energia szerinti osztályozása	376
4. Az újrakristályosodás	377
5. Irodalom	378

1. BEVEZETÉS

A reális kristályok mindig tartalmaznak nemegyensúlyi kristályhibákat. Ezek a test szabadentalpiáját növelik, ezért ez az állapot termodinamikailag nem stabil. Az adott feltételek mellett minimális szabadentalpiához tartozó egyensúlyi állapot kialakulása azonban a hibaeltűnési folyamatok aktiválását igényli. Mivel a különböző típusú hibák mozgásának aktiválásához szükséges energia széles határok között változik, ezért a különböző hibák észlelhető sebességű eltűnési folyamatai is csak széles határok között változó hőmérsékletek fölött indulnak meg. Azt a folyamatot, amelynek során valamely testet meghatározott időre olyan hőmérsékletre melegítünk, amelyen a vizsgálni kívánt hibaeltűnési folyamat észlelhető sebességgel végbemegy, *hőkezelésnek* nevezzük. Ebben az értelemben egyaránt hőkezelés tehát az, ha egy próbatestet 4 K-ről 10 K-re, vagy szobahőmérsékletéről 500 °C-ra melegítünk.

A nemegyensúlyi kristályhibák hőkezeléssel való megszüntetése alapvető fontosságú eleme a technológiai folyamatoknak is. Ez az oka annak, hogy a hőkezelések hatásával kapcsolatos jelenségek vizsgálata rendkívül széleskörű és sokrétű az irodalomban [1, 2]. Részben ennek következményeként, részben ismereteink fokozatos fejlődése miatt a jelenségkörrel kapcsolatos terminológia sokszor nem egyértelmű. Gyakran ugyanazon elnevezések részleteikben jelentősen különböző folyamatokat takarnak, máskor ugyanarra a folyamatra többféle elnevezést is használnak.

2. NEMEGYENSÚLYI KRISTÁLYHIBÁK KELETKEZÉSE

Mielőtt a hőkezelések alatt fellépő folyamatok természetét vizsgálnánk, célszerű röviden áttekinteni azokat az eljárásokat, amelyek során nemegyensúlyi kristályhibák keletkeznek a fémekben.

A fémek kristályrácsában fellépő saját hibákat (vakancia, intersticiális atom, diszlokáció, szemcsehatár) fizikai hibáknak, míg az idegen atomoktól eredő hibákat

(ötvözetekben) kémiai hibáknak is szokták nevezni. Fizikai hibákat három módszerrel hozhatunk létre:

1. *Befagyasztás*: ennek során az anyagot nagy sebességgel magas hőmérséklet-ről olyan alacsony hőmérsékletre hűtjük le, ahol a magas hőmérsékleten egyensúlyi hibakoncentráció tartósan megmarad, mert a hibák mozgása ezen a hőmérsékleten észrevehetően nem aktiválódik. Befagyasztás után gyakorlatilag csak vakanciák (vagy ezek komplexei: divakanciák stb.) keletkeznek.

2. *Besugárzás*: ennek során az anyagot alacsony hőmérsékleten (kb. 4 K) nagy-energiájú elektron, neutron, proton, stb. sugárzásnak vetjük alá. Ilyenkor vakanciák, intersticiális atomok, illetve ezek komplexei keletkeznek.

3. *Képlékeny alakítás*: az ennek során kialakuló hibaszerkezet nagy mértékben függ az alakítás mértékétől és hőmérsékletétől. Elegendően alacsony hőmérsékleten a mindig keletkező nagy számú diszlokáció mellett jelentős ponthiba koncentráció is kialakul [3].

Tisztán kémiai hibáknak tekinthetők a túltelített szilárd oldatokban levő oldott atomok, valamint az ilyen szilárd oldatok szétesésekor keletkező metastabil, illetve stabil fázisú részecskék [4]. Túltelített szilárd oldat is magas hőmérséklet-ről való gyors hűtéssel hozható létre, ilyenkor a folyamatot edzésnek nevezzük.

Ha fizikai hibákat ötvözetekben hozunk létre, akkor a hibaszerkezet jelentősen bonyolultabb lesz, mert a fizikai és kémiai hibák közötti kölcsönhatások sokféle, komplikált hibakonfiguráció kialakulását eredményezik.

3. A HIBAELTŰNÉSI FOLYAMATOK AKTIVÁLÁSI ENERGIA SZERINTI OSZTÁLYOZÁSA

Elegendően alacsony hőmérsékleteken a nemegyensúlyi kristályhibák is tartósan megmaradnak az anyagban, mert az eltűnési folyamatok egy-egy elemi lépésének be-következéséhez szükséges aktiválási energia termikus fluktuációk révén történő fedezése gyakorlatilag nulla valószínűségű. Növekvő hőmérséklettel azonban a kis aktiválási energiájú folyamatok egyre nagyobb valószínűséggel aktiválódnak és játszódhatnak le, majd ezt követi egy nagyobb aktiválási energiájú folyamat és így tovább. Az egyre növekvő hőmérsékletű hőkezelésekkel ezért a különböző aktiválási energiájú folyamatok bizonyos mértékig szétválaszthatók.

Tiszta fémekben növekvő aktiválási energia (és így durván növekvő hőmérséklet) alapján az alábbi eltűnési folyamatokat különböztethetjük meg.

1. *Ponthibák és ponthiba komplexek mozgása, illetve eltűnése*
 - a) intersticiális atomok mozgása és eltűnése nyelőkön (szemcsehatár stb.)
 - b) intersticiális-vakancia rekombináció,
 - c) vakancia diffúzió nyelőkhez,
 - d) vakancia kondenzáció diszlokációhurkokba, illetve üregekbe,
 - e) ponthibák eltűnése diszlokációkon.

Az ilyen típusú folyamatok természetével foglalkozik a 2.—4. fejezet.

2. *Ellenkező előjelű (Burgers vektorú) diszlokációk megsemmisülése és diszlokációhurkok eltűnése.*
3. *Diszlokáció átrendeződés alacsonyabb energiájú konfigurációkba (poligonizáció).*

Ez utóbbi két folyamat hajtóerejét és természetét elemzi az 5. és 6. fejezet. Az 1.—3. folyamatokat szokás közös néven megújulásnak nevezni.

4. *Diszlokációk és ponthibák megsemmisülése a deformált mátrixban mozgó szemcsehatárokon.*
5. *Az összes szemcsehatár felület csökkenése.*

A 3—5. folyamatok az alakított kristály teljes átalakulásához vezetnek, ezért ezeket a folyamatokat újrakristályosodásnak (rekrisztallizációnak) nevezzük. A 3. folyamat képezi az átmenetet a megújulásból az újrakristályosodásba.

4. AZ ÚJRAKRISTÁLYOSODÁS

Az újrakristályosodott szerkezet kialakulása általában bonyolult, többfázisú folyamat eredménye. A folyamat első fázisa a képlékenyen alakított mátrixban megy végbe a 3. és 4. eltűnési mechanizmus kíséretében. Ezt a folyamatot primer rekrisztallizációnak nevezzük, amelynek lefolyását két alapvető részmechanizmus jellemzi:

- a) *Nukleáció:* ennek során a mátrixhoz képest hibamentes tartomány alakul ki, amelyet nagyszögű szemcsehatár választ el a környezettől;
- b) *primer szemcsenövekedés:* az újrakristályosodási csíra (nukleus) határa elmozdul a deformált mátrixba.

A két folyamat addig tart, amíg az egész mátrixban egyenletes szemcseméret alakul ki. Mivel az újrakristályosodott tartomány lokálisan keletkező csírákból terjed ki a deformált mátrixba, ezért ezt a folyamatot *nem folytonos* rekrisztallizációnak is nevezik.

Az utóbbi elnevezést az indokolja, hogy extrém nagy képlékeny alakváltozások után diszlokáció átrendeződéssel az egész mátrixban egyidejűleg is végbemehet az új szemcsék kialakulása. Ezt a 3. mechanizmussal kapcsolatos folyamatot *in situ*, vagy folytonos rekrisztallizációnak nevezzük. Eltérő lehet az új szemcsék kialakulása igen kis mértékű alakítások után is. Ilyenkor új szemcsék lokálisan aktivált szemcsehatár mozgással, azaz a 4. mechanizmussal is kialakulhatnak. A primer rekrisztallizáció sajátágaival foglalkoznak a 7—10. fejezetek.

A primer rekrisztallizáció befejeződése után (az egész mátrix hibamentes, egyenletes méretű szemcsékből áll) egy további, jellegzetes folyamat alakul ki. Ennek során a mátrix egyes tartományaiban a környezethez képest jelentősen nagyobb méretű szemcsék keletkeznek. Ezt a folyamatot szemcsedurvulásnak vagy szekunder rekrisztallizációnak nevezzük. Ezzel foglalkozik a 11., 12. fejezet.

Az eddig felsorolt jelenségek csupán a hőkezelés hatására fellépő folyamatokkal voltak kapcsolatosak. Alapvetően fontosak azonban, különösen technológiai szem-

pontból, azok a megújulási és újrakristályosodási folyamatok, amelyek elegendően magas hőmérsékleti alakításkor az alakítás során végbemennek. Ezeknek a folyamatoknak a megértése felé csak a legutóbbi években történtek meg az első lépések, s ezekről nyújt áttekintést a 13. fejezet.

IRODALOM

1. Properties of Atomic Defects in Metals, *J. Nucl. Mat.* 69—70, 1—849, 1978.
2. Recrystallization of Metallic Materials, (ed. *F. Haessner*) Riederer Verlag, Stuttgart, 1978.
3. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
4. Lendvai J., *Magyar Fiz. Folyóirat*, 26, 245, 1978.

2. PONTHIBA ELTŰNÉS BEFAGYASZTOTT FÉMEKBŐL

BÉRCES GYÖRGY
ELTE, Általános Fizika Tanszék

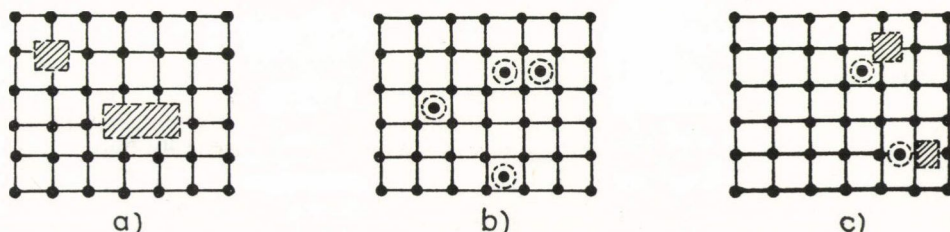
TARTALOM

1. Bevezetés	379
2. Ponthibák termikus egyensúlyban	380
2.1 Vakanciák, intersticiálisok tiszta fémekben	381
2.2 Vakanciacsoportok keletkezése	381
2.3 Vakanciák híg ötvözetekben	382
3. A képződési energia, kötési energia meghatározásának elméleti módszerei	383
4. A képződési energia, kötési energia meghatározásának kísérleti módszerei	383
5. Termikus egyensúlyban történő mérések	383
6. Ponthibák keltése befagyasztással	386
7. Ponthibák hatása a fémek ellenállására	388
8. A képződési energia, kötési energia meghatározása a befagyasztás utáni elektromos ellenállás növekedéséből	389
9. Befagyasztott vakanciák eltűnése fémekben	393
10. Izokron hőkezelések	393
11. Izoterm hőkezelések	395
12. Összefoglalás	399
13. Irodalomjegyzék	400

1. BEVEZETÉS

A kristályok periodikus szerkezetének atomi méretű rendellenességeit ponthibáknak nevezzük. Tiszta fémek kristályrácsában lehetnek üres rácshelyek (vakanciák), vagy intersticiális (rácsközi) atomok (1. ábra).

A ponthibák tulajdonságainak ismerete különösen fontos a vezetési jelenségek és diffúziós folyamatok megértésében. A fémek mechanikai és plasztikus tulajdonságai



1. ábra. Tiszta fémekben előforduló leggyakoribb ponthibák a) vakancia (üres rácshely), b) intersticiális atom (atom rácsközi helyen), c) Frenkel hiba (üres rácshely és rácsközi atom együtt)

gai is jelentős mértékben megváltozhatnak a ponthiba-diszlokáció kölcsönhatás következtében.

A ponthibák vizsgálatához olyan mintát kell előállítani, amely kellő számban tartalmazza a vizsgálandó hibát. A ponthibák termodinamikailag stabil képződmények, mégis a kísérletek nagy részében szükség van nem egyensúlyi többlethiba bevitelére az anyagba. Ennek a leggyakoribb módjai a következők [1]:

1. befagyasztás,
2. plasztikus deformáció,
3. elemi részecskék besugárzása.

Az egyik legelterjedtebb módszer a befagyasztás (magas hőmérsékletéről történő gyors hűtés), nagy előnye, hogy a fémekben gyakorlatilag csak vakanciák keletkeznek, míg plasztikus deformáció vagy besugárzás során vakanciák és rácsközi atomok egyaránt keletkeznek.

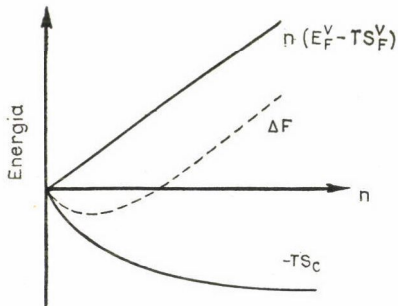
Ebben a dolgozatban tiszta fémekben és híg ötvözetekben befagyasztás során keletkező ponthibák tulajdonságaival foglalkozunk.

2. PONTNIBÁK TERMIKUS EGYENSÚLYBAN

Egy kristály egyensúlyi állapotát állandó T hőmérsékleten és p nyomáson a

$$G = E - TS + pV \quad (1)$$

szabadentalpia minimuma jellemzi, ahol E a kristály belső energiája, S az entrópiája és V a térfogata. A tökéletes kristályszerkezethez tartozó szabadentalpia értéke megváltozik a hibák keletkezésekor. Ez a változás általában négy tagból tevődik össze:



2. ábra. A szabadenergia ΔF változása a vakanciák számának (n) függvényében

1. A hiba keletkezése a kristály belső energiáját E_F -el növeli. E_F -et a hiba képződési energiájának nevezzük.

2. Minden új hiba módosítja az adott makroállapotot megvalósító mikroállapotok W számát. Ezt a változást az

$$S_C = k \ln W \quad (2)$$

konfigurációs entrópiataggal kell figyelembe venni, ahol k a Boltzmann állandó.

3. Megváltozik a hiba körüli atomok rezgési frekvenciája, amely S_F képződési entrópia járulékot eredményez.

4. A hiba keletkezése V_F képződési térfogatváltozással jár. Az ezzel együttjáró szabadentalpia járulék közönséges nyomáson elhanyagolható, ezért ilyenkor a kristály egyensúlyának meghatározásakor elegendő az

$$F = E - TS \quad (3)$$

szabadenergiát vizsgálunk (2. ábra).

2.1 Vakanciák, intersticiálisok tiszta fémekben

A fentiekben alapuló részletes számolások azt mutatják [2, 3], hogy tiszta fémekben a vakanciák egyensúlyi koncentrációja a

$$C_V[T] = \exp\left\{\frac{S_F^V}{k}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{E_F^V}{kT}\right\} \quad (4)$$

kifejezéssel adható meg. Intersticiális atomokra hasonló módon

$$C_I[T] = q \exp\left\{\frac{S_F^I}{k}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{E_F^I}{kT}\right\}, \quad (5)$$

ahol q jelöli a hibátlan rács egy atomjára jutó rácsközi helyek számát (fcc fémeknél $q=3$, tck fémeknél $q=9$).

Felületen centrált köbös fémekre végzett elméleti számolások azt mutatják, hogy az intersticiálisok képződéséhez szükséges energia többszöröse a vakanciaképződés energiájának. Ha feltesszük, hogy $E_F^V \cong 1$ eV, $E_F^I \cong 2$ eV, C_I/C_V hányadosra 10^{-5} körüli érték adódik $T=1000$ K-en, $S_F^V = S_F^I$ felhasználásával. Ezt az eredményt a kísérletek is alátámasztják, ami azt jelenti, hogy termikus egyensúlyban elsősorban a vakanciákkal, illetve az ezekből kialakuló kisebb-nagyobb csoportosulásokkal kell számolnunk.

2.2 Vakanciacsoportok keletkezése

A termikus egyensúlyban levő vakanciák mozgása diffúzió útján történik. Mozgásuk során találkozhatnak egymással és kisebb vagy nagyobb csoportokat képezhetnek. A legegyszerűbb képződmény két vakancia egymáshoz kapcsolódásával jön létre (3. ábra). Az így létrejövő pár (divakancia) akkor lesz stabil, ha a pár képződéséhez szükséges E_F^{2V} energiára teljesül az alábbi egyenlőtlenség:

$$E_F^{2V} - 2E_F^{1V} = -E_B^{2V} < 0, \quad (6)$$

E_B^{2V} -t a divakancia kötési energiájának nevezzük.

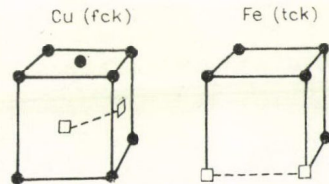
A divakanciák egyensúlyi koncentrációja [3, 5]:

$$C_{2V}[T] = \frac{Z}{2} C_{1V}^2 \cdot \exp\left\{\frac{E_B^{2V}}{kT}\right\}, \quad (7)$$

ahol Z a koordinációs szám (fcc rácsra $Z=12$, tck rácsra $Z=8$). E_B^{2V} értéke néhány tized eV, ami egyben azt is jelenti, hogy C_{2V} számértékileg sokkal kisebb mint C_{1V} (1. táblázat), mégis a divakanciák hatásával számolnunk kell a fémekben, elsősorban alacsony mozgási aktiválási energiájuk miatt.

A kis vakanciacsoportosulásokhoz tartoznak még a három, négy vakanciát tartalmazó képződmények is. Ezeknek a csoportoknak a mozgékonyasága általában csökken a további vakanciák befogásával.

A vakanciákból nagyobb csoportok, üregek, diszlokációhurkok is létrejöhetnek [6, 7], az ilyen folyamatok azonban inkább a befagyasztás, vagy öregítés során lényegesek.



3. ábra. Divakanciák stabil formái rézben és vasban [4]

1. TÁBLÁZAT

Vakanciák és divakanciák számának alakulása alumíniumban
($E_F^V = 0,70$ eV, $S_F^V/k = 1,69$, $E_B^{VS} = 0,14$ eV — [36])

$T(^{\circ}\text{C})$	0	100	200	300	400	500	600
C_V	$6,3 \times 10^{-13}$	$1,9 \times 10^{-9}$	$1,9 \times 10^{-7}$	$3,7 \times 10^{-6}$	$3,1 \times 10^{-5}$	$1,5 \times 10^{-4}$	$4,9 \times 10^{-4}$
C_{2V}	$9,2 \times 10^{-22}$	$1,6 \times 10^{-15}$	$6,4 \times 10^{-12}$	$1,4 \times 10^{-9}$	$6,3 \times 10^{-8}$	$1,1 \times 10^{-6}$	$9,2 \times 10^{-6}$
C_{2V}/C_V	$1,5 \times 10^{-9}$	$8,7 \times 10^{-6}$	$3,5 \times 10^{-5}$	$3,8 \times 10^{-4}$	$2,1 \times 10^{-3}$	$7,2 \times 10^{-3}$	$1,9 \times 10^{-2}$

2.3 Vakanciák híg ötvözetekben

Híg, homogén ötvözetekben a szennyező atomok a vakanciák elhelyezkedését, mozgását lényegesen befolyásolhatják. Ha ugyanis a szennyező atom és a vakancia egymás melletti elhelyezkedése energetikailag kedvezőbb állapotot hoz létre, akkor ez a pár (Johnson molekula) stabil képződmény lesz és a vakancia a szennyezőhöz rögzítődik. Várható, hogy ezáltal a szennyező atom mozgási aktiválási energiája csökken, azaz a párok képződése megkönnyíti a szennyező atomok mozgását.

A 2. fejezetben leírtak alapján kiszámítható a híg ötvözetben, termikus egyensúlyban levő szabad (C_{1V}) és kötött (C_{VS}) állapotban levő vakanciák együttes száma [8, 9]:

$$C_V = C_{1V} + C_{VS}, \quad (8)$$

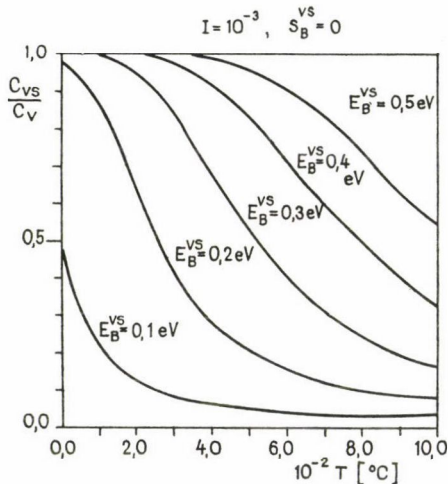
ahol

$$C_{1V}[T] =$$

$$= (1 - ZI) \cdot \exp\left\{\frac{S_F^{1V}}{k}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{E_F^{1V}}{kT}\right\}, \quad (9)$$

$$C_{VS}[T] =$$

$$= ZI \cdot \exp\left\{\frac{S_F^{1V} + S_B^{VS}}{k}\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{E_F^{1V} - E_B^{VS}}{kT}\right\}. \quad (10)$$



4. ábra. C_{VS}/C_V hőmérsékletfüggése

I a szennyező koncentráció, E_B^{VS} és S_B^{VS} a vakancia szennyező atom kötési energiája és kötési entrópiája. A 4. ábra a C_{VS}/C_V hányados hőmérsékletfüggését mutatja különböző E_B^{VS} értékek mellett.

3. A KÉPZŐDÉSI ENERGIA, KÖTÉSI ENERGIA MEGHATÁROZÁSÁNAK ELMÉLETI MÓDSZEREI

A vakancia képződési energiájára vagy egy összetett képződmény (divakancia, vakanciacsoport, vakancia-szennyező pár, stb.) kötési energiájára vonatkozó számítások mindig meghatározott modellhez kapcsolódnak, amely lényegében meghatározza a számolási módszereket és eljárásokat. Az alábbiakban felsoroljuk a leggyakrabban alkalmazott modelleket és néhány jellemző tulajdonságukat.

1. Kötési modell. A modell feltételezi az atomok közötti rövid hatótávolságú kölcsönhatást, ami egy átlagos kötési energiával jellemezhető. Egy atom kristályból történő kiszakításához szükséges energia az atommal kölcsönhatásban álló szomszédos atomok számával, valamint a kötés erősségével arányos. Így a vakancia képződési energiája a kristály szublimációs hőjével hozható kapcsolatba. Habár ez egy elég durva modell, mégis sok tapasztalati összefüggés magyarázatára alkalmas és jó becslések nyerhetők belőle [10, 11].

2. Kontinuum modell. A felmerülő problémák megoldása a kontinuummechanika segítségével történik [12, 13, 14]. Az eredményekben az anyag makroszkopikus paraméterei (felületi feszültség, rugalmassági állandók stb.) szerepelnek. A nemlokális kontinuum elmélet átmenetet jelent a rácsmodellhez [15].

3. Rácsmodell. Az atomok közötti kölcsönhatást empirikus potenciálfüggvényekkel veszik figyelembe, amelynek ismeretlen paraméterei anyagi állandókkal hozhatóak kapcsolatba [16, 17, 18]. A diszkrét rácselmélet mellett különböző kvantummechanikai módszereket alkalmaznak a vakanciák, vakanciacsoportok, vakancia-szennyező párok tulajdonságainak vizsgálatánál [19, 20].

4. A KÉPZŐDÉSI ENERGIA, KÖTÉSI ENERGIA MEGHATÁROZÁSÁNAK KÍSÉRLETI MÓDSZEREI

A vakanciák képződési energiájának meghatározására igen sokféle kísérleti módszer ismeretes [1]. Ezekben a kísérletekben a kristály olyan fizikai paraméterét mérjük, amely a hibakoncentráció ismert függvénye. A legtöbb fizikai tulajdonság azonban igen erősen függ a hőmérséklettől is. Ezért nagyon fontos a hőmérsékleti hatásokat leválasztani a mért eredményekről, hogy ezáltal pusztán a hibák hatását kapjuk meg.

Az alkalmazott kísérleti módszerek két csoportba sorolhatók:

1. Mérés termikus egyensúlyban.
2. Mérés befagyasztott állapotban, alacsony hőmérsékleten.

Mielőtt a befagyasztott állapotban történő mérésekről szó esne, röviden összefoglaljuk a termikus egyensúlyi, leggyakoribb kísérleti módszereket.

5. TERMIKUS EGYENSÚLYBAN TÖRTÉNŐ MÉRÉSEK

Meehan és Eggleston [21] voltak az elsők, akik réz és arany fajlagos ellenállását mérték magas hőmérsékleten, hogy meghatározzák a vakanciák hatását. A 600 °C alatt mért adatokhoz egy

$$\varrho(T) = A + BT + CT^2 \quad (11)$$

egyenletű parabolát illesztettek. Magasabb hőmérsékleten azt tapasztalták, hogy a mért ellenállás nagyobb, mint a (11)-ből extrapolált érték. Ezt a különbséget a vakanciák hatásának tulajdonították. Feltételezték, hogy a vakanciák által okozott ellenállásnövekedés a koncentrációjukkal arányos. A mért és extrapolált értékek különbségének logaritmusát ábrázolva az abszolút hőmérséklet reciprokának függvényében, egyenest kaptak és a képződési energiát rézben 0,90 eV-nak, aranyban 0,67 eV-nak találták. A méréssel kapcsolatban több probléma is felmerül. Az egyik az, hogy valószínűleg magas hőmérsékleten nem teljesül a rácsrezgésektől származó ellenállásnövekedésre a (11) összefüggés. Másrészt, az ilyen mérés igen precíz hőmérsékletbeállítást és ellenállásmeghatározást igényel, hiszen például 600 °C-on, alumíniumban a vakanciák által okozott, kevesebb mint 0,1 $\mu\Omega\text{cm}$ fajlagos ellenállásnövekedés a minta fajlagos ellenállásának ($\sim 10 \mu\Omega\text{cm}$) csupán 1%-a.

Az egyensúlyi hibakoncentráció és ezzel együtt E_F^V , S_F^V meghatározásának az egyik legpontosabb módszere a rácsparaméter és hosszúságváltozás egyidejű mérésén alapul [22, 23]. Tekintsünk egy T hőmérsékleten levő kristályt, amely N darab egyforma atomot tartalmaz Ω_0 atomtérfogattal. A vakancia keletkezése megnöveli a kristály térfogatát, ez a növekedés azonban a hiba körüli rácsrelaxáció miatt általában kisebb mint az Ω_0 atomtérfogat. Ha a vakanciák közti kölcsönhatást elhanyagoljuk és a rácsrelaxáció következtében fellépő átlagos térfogatváltozást $\Delta v'$ -vel jelöljük, akkor a kristályban levő n számú vakanciától származó ΔV térfogatváltozás

$$\Delta V = n\Omega_0 + n\Delta v'. \quad (12)$$

A vakanciát tartalmazó kristály rácsponjtjainak száma $N+n$. Legyen az egy rácspontra jutó átlagos térfogat $\Omega_0 + \Delta\Omega$, akkor a kristály teljes térfogata a következőképpen adható meg:

$$(N+n)(\Omega_0 + \Delta\Omega) = N\Omega_0 + \Delta V. \quad (13)$$

Ebből a (12) kifejezés felhasználásával:

$$\frac{\Delta\Omega}{\Omega_0} = \frac{n}{n+N} \frac{\Delta v'}{\Omega_0} = C_V \frac{\Delta v'}{\Omega_0}. \quad (14)$$

Ez a térfogatváltozás a vakanciák körüli atomok elmozdulásából, vagyis az a_0 átlagos rácsparaméter megváltozásából adódik, ezért:

$$\left. \frac{\Delta\Omega}{\Omega_0} \right|_{\text{rel}} = 3 \left. \frac{\Delta a}{a_0} \right|_{\text{rel}}. \quad (15)$$

Ezen utóbbi egyenlet segítségével (14)-ből a

$$\left. \frac{\Delta a}{a_0} \right|_{\text{rel}} = \frac{1}{3} C_V \frac{\Delta v'}{\Omega_0} \quad (16)$$

kifejezés nyerhető. Ha $\frac{\Delta v'}{\Omega_0} \cong -0,5$ és $C_V \cong 10^{-3}$, akkor $\left. \frac{\Delta a}{a_0} \right|_{\text{rel}} \cong -2 \times 10^{-4}$.

A vakanciáktól származó, eredő $\Delta V/V_0|_{\text{hiba}}$ relatív térfogatváltozás kifejezhető a minta relatív hosszváltozásával, $\Delta l/l_0|_{\text{hiba}}$ -val a

$$\left. \frac{\Delta V}{V_0} \right|_{\text{hiba}} = 3 \left. \frac{\Delta l}{l_0} \right|_{\text{hiba}} \quad (17)$$

alakban. A (12), (17) egyenletek és

$$V_0 = N\Omega_0 \quad (18)$$

felhasználásával:

$$\left. \frac{\Delta l}{l_0} \right|_{\text{hiba}} = \frac{1}{3} \cdot C_V \left(1 + \frac{\Delta v'}{\Omega_0} \right). \quad (19)$$

A (16) és (19) összefüggésekből

$$C_V = 3 \left(\left. \frac{\Delta l}{l_0} \right|_{\text{hiba}} - \left. \frac{\Delta a}{a_0} \right|_{\text{rel}} \right) \quad (20)$$

adódik. A fenti kifejezés a C_V koncentrációjú vakanciák által okozott relatív hosszúság és relatív rácsparaméter változás között teremt kapcsolatot egy adott hőmérsékleten. Mivel a hőmérséklet változtatásából származó $\Delta l/l_T$ és $\Delta a/a_T$ értékek megegyeznek, ezért tetszőleges hőmérsékleten érvényes a

$$C_V = 3 \left(\frac{\Delta l}{l} - \frac{\Delta a}{a} \right) \quad (21)$$

összefüggés.

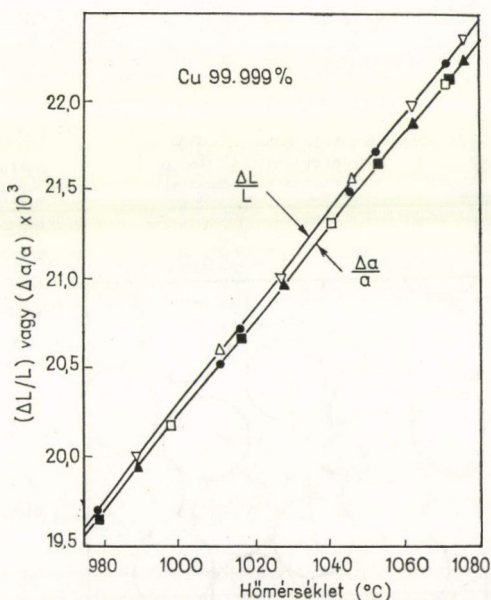
C_V hőmérsékletfüggésének ismeretében a (4) kifejezés felhasználásával már meghatározható a vakanciák képződési energiája és entrópiája. Az 5. ábra nagytisztaságú Cu rúd (99,999%) relatív hossz és rácsparaméter változását mutatja a hőmérséklet függvényében [24]. A hosszúságváltozást nagy pontosságú dilatométerrel, a rácsparaméter megváltozását röntgendiffrakcióval mérték. A kísérlet sikerességéhez a mintán belül igen egyenletes és stabil hőmérsékletet kellett biztosítani. Néhány gyakori fémre a 2. táblázatban feltüntettük E_F^V és az olvadásponti C_V értékét [24].

Nagy pontosságú kaloriméteres mérésekből is következtethetünk a vakanciák képződési energiájára. Tegyük fel, hogy az m tömegű kristály hőmérséklete T -ről $T + \Delta T$ -re nő. A pont hibák számának megnövekedéséből származó belső energia változás:

$$\Delta U = (NC_V[T + \Delta T] - NC_V[T]) \cdot E_F^V \quad (22)$$

ha pusztán a vakanciák jelenlétével számolunk, ahol N a rács atomjainak a száma. Így a vakanciáktól származó Δc_p fajhőjárulék

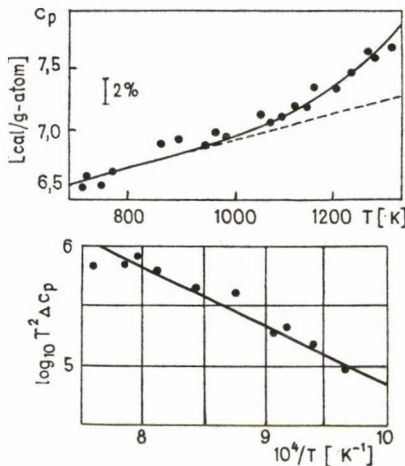
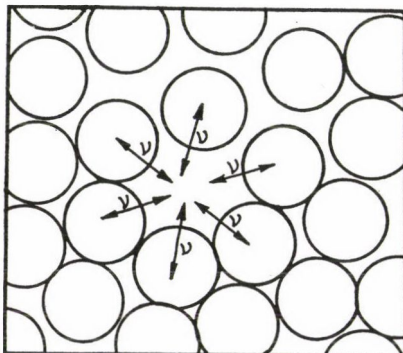
$$\begin{aligned} \Delta c_p[T] &= \\ &= \frac{1}{m} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_p = \frac{Nk}{m} \left(\frac{E_F^V}{kT} \right)^2 \cdot C_V[T], \end{aligned} \quad (23)$$



5. ábra. Hosszúság és rácsparaméter változása a hőmérséklet függvényében, rézben [24]

2. TÁBLÁZAT

Fém	E_F^V (eV)	C_V olvadáspontnál
Cu	$1,17 \pm 0,11$	$2,0 \times 10^{-4}$
Ag	$1,09 \pm 0,10$	$1,7 \times 10^{-4}$
Au	$0,94 \pm 0,09$	$7,2 \times 10^{-4}$
Al	$0,75 \pm 0,07$	$9,4 \times 10^{-4}$

6. ábra. Δc_p változása a hőmérséklet függvényében [25]

7. ábra. Ábra az öndiffúzióhoz

ami az R egyetemes gázállandó és M atom-súly bevezetésével a

$$\Delta c_p[T] = \frac{R}{M} \left(\frac{E_F^V}{kT} \right)^2 C_V[T] \quad (24)$$

alakra hozható.

Alumíniumban ($c_p = 0,214$ cal/g°C szoba-hőmérsékleten) olvadáspont környezetében ($T_M \approx 660$ °C) Δc_p -re 6×10^{-3} cal/g°C adódik, ami azt jelenti, hogy igen kis fajhőváltozásokról van szó, ezért a mérés elvégzése csak nagy érzékenységgű kaloriméterrel lehetséges. A mért Δc_p adatokból $\ln(T^2 \Delta c_p)$ -t, $1/T$ függvényében ábrázolva megkaphatjuk E_F^V , S_F^V értékét. Kraftmakher és Strelkov [25] több anyag esetében végzett ilyen típusú mérést. Aranyra vonatkozó eredményük a 6. ábrán látható. Guarini és Schianini [26] alumíniumban a képződési energiára $0,7 \pm 0,03$ eV-ot kaptak, az olvadásponti vakanciakoncentrációt pedig $(6 \pm 0,8) \times 10^{-4}$ -nek becsülték.

A diffúziós kísérletek elsősorban a vakanciák mozgásáról nyújtanak információt [27, 28]. A vakancia ugrási frekvenciája a rácsban a

$$\nu = Z\nu_0 \exp \left\{ \frac{S_M^V}{k} \right\} \exp \left\{ -\frac{E_M^V}{kT} \right\} \quad (25)$$

kifejezéssel adható meg, ahol E_M^V , S_M^V a vakancia mozgási aktiválási energiája, illetve entrópiája, ν_0 az atomok rezgési frekvenciája. Egy atom mozgásának a valószínűsége (az öndiffúzió sebessége) arányos az atomhoz legközelebb levő vakancia megtalálásának valószínűségével (azaz arányos a C_V -vel), valamint a vakancia ν ugrási frekvenciájával (7. ábra). Így a D öndiffúziós együtthatóra

$$D \sim \nu C_V \quad (26)$$

adódik. Felhasználva a (4) és (25) összefüggéseket:

$$D \sim \exp \left\{ -\frac{E_F^V + E_M^V}{kT} \right\}. \quad (27)$$

Az öndiffúzió aktiválási energiája (E_{SD}^V) a vakanciák képződési és mozgási aktiválási ener-

giájával tehát az

$$E_{SD}^V = E_F^V + E_M^V \quad (28)$$

alakban kifejezhető.

Az öndiffúzió aktiválási energiája radioaktív nyomjelző technikával pontosan mérhető, így a (28) egyenlet jobb oldalán álló bármelyik mennyiség ismeretében a másikra tudunk következtetni. E_M^V -t például eltűnési folyamatokból (11. pont) határozhatjuk meg.

A kristályhibák tanulmányozásában igen nagy segítséget nyújtanak az utóbbi években kifejlesztett pozitron besugárzásos kísérletek [29, 30]. A vizsgált fémbe egy radioaktív forrásból pozitronok jutnak, amelyek a vezetési, vagy a nagyobb energiájú törzs-elektronokon megsemmisülnek. A szétsugárzás két γ foton formájában történik. A hibák (vakanciák, diszlokációk, szemcsehatárok) a rács torzulását eredményezik, ami a hiba környezetében az elektronsűrűség megváltozásával is jár. Ezek a helyek a pozitronok számára egy vonzó potenciált jelentenek, ezért a hibákhoz kötődnek. Megváltozik ezáltal az anyagból kilépő sugárzás jellege, amiből a hibák számára, képződési, esetleg kötési energiájára tudunk következtetni [31, 32].

6. PONTTHIBÁK KELTÉSE BEFAGYASZTÁSSAL

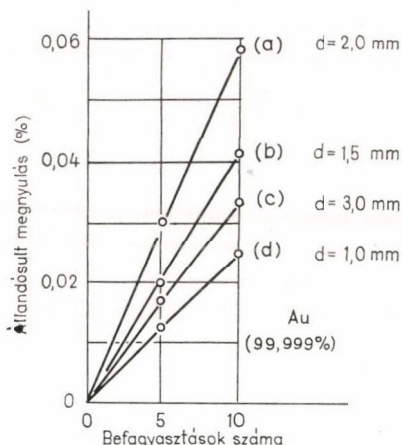
Az 1. táblázat a vakanciák és divakanciák egyensúlyi koncentrációját mutatja a hőmérséklet függvényében alumíniumra. Jól látható, hogy a hőmérséklet emelkedésével rohamosan nő a hibák száma. Ha egy ilyen magas hibakoncentrációjú mintát olyan gyorsan hűtenénk le, hogy ezalatt a benne levő vakanciák egyetlen ugrást sem tudnának csinálni, akkor az alacsonyabb hőmérsékleten a vakanciákban túltelített szilárd oldat jönne létre, ami a kicsiny termikusan aktivált mozgás miatt hosszabb ideig is fennmaradhat. A vakancia egyetlen ugrásához szükséges τ idő (25) felhasználásával

$$\tau = \frac{1}{Z\nu_0} \exp\left\{-\frac{S_M^V}{k}\right\} \cdot \exp\left\{\frac{E_M^V}{kT}\right\}. \quad (29)$$

Alumínium esetén az $E_M^V \cong 0,65$ eV, $S_M^V/k \cong 1$, $Z = 12$, $\nu_0 \cong 10^{13}$ l/s értékek felhasználásával, az olvadáspont ($T_M \cong 660^\circ\text{C}$) közeléből történő hűtésnél τ -ra $\sim 10^{-11}$ s adódna. A tökéletes befagyasztás tehát $\Theta \cong 10^{13}$ K/s hűtési sebességet igényelne, ami kísérletileg megvalósíthatatlan. A gyakorlatban elérhető hűtési sebességek 10^4 K/s, 10^5 K/s körüliek.

Felesleges azonban megkövetelni azt, hogy a vakanciák csak egyet ugorhassanak, hiszen ez általában még nem vezet elnyelődéshez. Lomer azt találta [33], hogy adott mintánál, adott hűtési sebesség mellett létezik egy T_c kritikus hőmérséklet, ami alól hűtve a mintát az mindig túltelítetté válik az alacsonyabb hőmérsékleten. Ez egyben azt is jelenti, hogy a kísérletileg megvalósítható 10^4 K/s— 10^5 K/s hűtési sebességekkel a legtöbb esetben elérhető a vakanciák nagy részének befagyasztása.

A befagyasztás során számos zavaró jelenség felléphet, ezek közül a legfontosabbak:



8. ábra. Mintaméret megváltozása a befagyasztások során [35]

1. A befagyasztás után a monovakanciák mellett kisebb csoportosulások is találhatók.

2. A befagyasztás közben a vakanciák mozognak, a környező nyelőkhöz (szabad felület, diszlokáció, szemcsehatár, stb.) vándorolva azokon eltűnhetnek. Ezért azonosnak tűnő kísérleti körülmények mellett is a befagyasztás után más és más lehet a túltelítettség mértéke.

3. A nagy hűtési sebesség a mintában feszültségeket idéz elő (quench strain) [34], ami plasztikus deformáció útján vakancianyelőket hoz létre. Vékony mintáknál a mintaméret megváltozása is létrejöhet (mintaméret korrekció) [34, 35, 36].

A 8. ábrán különböző d átmérőjű Au huzalok megnyúlása látható 800 °C-ról történt öt, illetve tízszeri leedzés után.

7. PONT Hibák HATÁSA A FÉMEK ELLENÁLLÁSÁRA

Befagyasztás után a pont hibák jelenlétére, mozgására — a kísérletek nagy részében — ellenállásméréssel következtethetünk. A kristályhibák megnövelik a fémek ellenállását. A tapasztalat azt mutatja, hogy vakanciák esetében első közelítésben teljesül a Matthiessen szabály [37], azaz a kristály $\varrho(T)$ fajlagos ellenállása kifejezhető a

$$\varrho(T) = \varrho_0(T) + \varrho_V C_V \quad (30)$$

alakban. $\varrho_0(T)$ a rácsrezgésektől származó ellenállás, ϱ_V pedig az egységnyi vakancia-koncentráció ellenállásjáruléka. ϱ_V értékét néhány fémre a 3. táblázat mutatja. Alacsony hőmérsékleten $\varrho_0(T)$ kicsi, ezért a hibák hatása itt jobban érvényesül. Megmérve a minta ellenállását (például cseppfolyós nitrogénben vagy héliumban), a C_V hiba-koncentrációra tudunk következtetni.

Ha figyelembe vesszük a vakanciacsoportok hatását, a fentiek némiképp módosulnak. Például a divakancia elektromos ellenállása mintegy 2—3%-kal kisebb mint két különálló vakanciáé együtt [36]. Hasonló a helyzet híg ötvözeteknél is. A vakancia és szennyező összekapcsolódása során keletkező pár ϱ_{VS} ellenállására többnyire

$$\varrho_{VS} < \varrho_V + \varrho_S \quad (31)$$

teljesül, ahol ϱ_S az egységnyi koncentrációjú szennyező ellenállásjáruléka az adott fémbe. Az eltérés jellemzésére az

$$\varepsilon = \frac{\varrho_{VS} - \varrho_S}{\varrho_V} \quad (32)$$

3. TÁBLÁZAT

Vakanciák ellenállásjáruléka és képződési energiája néhány fémekben

Fém	Ellenállás ($\mu\Omega\text{cm/at \%}$)	$E_F^V(\text{eV})$	Hivatkozás
Ag	1,8	1,02	[41]
Al	1,05	0,70	[36]
Au	1,69	0,97	[42]
Cu	1,7	1,14	[41]
Ni	~3	1,60	[43]
Pt	5,8	1,30	[44]

kifejezés használatos. *Takamura* [34, 38] alumíniumötvözeteken végzett mérési sorozatot ϱ_{VS} meghatározására. Eredménye a 4. táblázatban látható.

ϱ_{VS} elméleti meghatározására is történtek kísérletek. *Keller* [39] szerint aranyban ezüst szennyező esetén

$$\varrho_{V+Ag} = \varrho_V + \varrho_{Ag} - 0,11(\varrho_V \cdot \varrho_{Ag})^{1/2}, \quad (33)$$

míg cink szennyezőre

$$\varrho_{V+Zn} = \varrho_V + \varrho_{Zn} + 0,10(\varrho_V \cdot \varrho_{Zn})^{1/2}. \quad (34)$$

4. TÁBLÁZAT

Hibák ellenállásjáruléka híg alumínium ötvözetekben [38]

Szennyező koncentráció (at. %)	ϱ_S ($\mu\Omega\text{cm/at. \%}$)	ϱ_{VS} ($\mu\Omega\text{cm/at. \%}$)	ε
Al—Si(0,50, 0,10, 0,13)	$0,76 \pm 0,01$	$1,35 \pm 0,02$	0,56
Al—Mg(0,11, 0,21, 0,32)	$0,45 \pm 0,01$	$0,76 \pm 0,06$	0,30
Al—Zn(0,05, 0,10, 0,20)	$0,26 \pm 0,01$	$0,42 \pm 0,04$	0,15
Al—Ag(0,04)	$1,39 \pm 0,02$	$\sim 1,45$	$\sim 0,06$

$$\varrho_V = 1,05 \mu\Omega\text{cm/at \%}$$

8. A KÉPZŐDÉSI ENERGIA, KÖTÉSI ENERGIA MEGHATÁROZÁSA A BEFAGYASZTÁS UTÁNI ELEKTROMOS ELLENÁLLÁS NÖVEKEDÉSÉBŐL

A vakancia képződési energiájának, a vakancia szennyező atom kötési energiájának meghatározására az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás, a minta elektromos ellenállásváltozásának a mérése a befagyasztás előtti állapothoz képest.

Ha egy tiszta fémbe T_Q hőmérsékleten levő vakanciákat $T_0 < T_Q$ hőmérsékletre, $\Theta = \frac{dT}{dt}$ hűtési sebességgel befagyasztjuk, a befagyasztás közben és utána is a T_Q hőmérsékletre tartozó $C_V(T_Q)$ egyensúlyi koncentráció egyre csökken. Ezért alacsony hőmérsékleten megmérve a minta $\Delta\varrho$ ellenállásnövekedését, figyelembe kell venni a befagyasztás során elkerülhetetlen koncentrációcsökkenést egy $0 < \lambda < 1$ faktorial:

$$\Delta\varrho = \varrho_V [\lambda(T_Q, T_0, \Theta, \dots) \cdot C_V(T_Q)]. \quad (35)$$

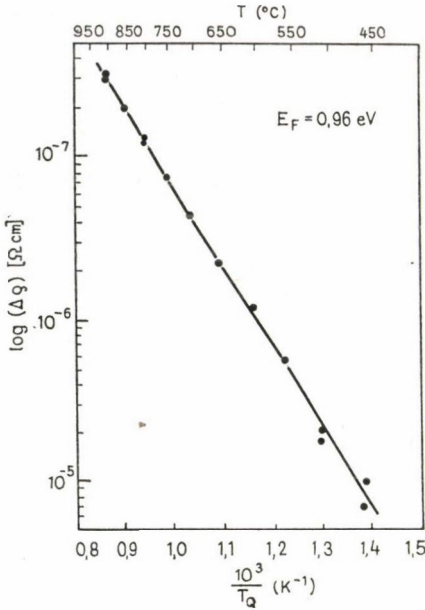
A λ tényező értéke még számos paramétértől függhet, így a minta előéletétől, a hűtőközegetől, a minta méreteitől, az alacsony hőmérsékletre történő áttevés idejétől stb.

Ha különböző hőmérsékletekről történt edzéseknél a kísérleti körülményeket reprodukálni tudjuk, és feltételezzük, hogy λ a T_Q befagyasztási hőmérséklettől csak kicsit függ, (azaz $\lambda(T_Q) \cong \text{áll.}$) ez esetben az ellenállásváltozásra

$$\Delta\varrho(T_Q) = \lambda\varrho_V C_V(T_Q) \quad (36)$$

adódik. Mindkét oldal logaritmusát véve, valamint a (4) összefüggést felhasználva:

$$\ln \Delta\varrho(T_Q) = \text{konst.} - \frac{E_F^V}{kT_Q}. \quad (37)$$



9. ábra. A befagyasztás utáni kezdeti ellenállásnövekedés $1/T_Q$ függvényében [40]

találhatók a mintában, így a fajlagos ellenállás

$$q'(T) = q_0(T) + \lambda_{1V} C_{1V} q_V + \lambda_{VS} C_{VS} q_{VS} + (1 - \lambda_{VS} C_{VS}) q_S \quad (40)$$

lesz, ahol λ_{1V} és λ_{VS} a befagyasztás során eltűnő szabad vakanciák, illetve párok hányadát adja meg. A kezdeti állapothoz képest az ellenállásváltozás:

$$\Delta q = q' - q = \lambda_{1V} C_{1V} q_V + \lambda_{VS} C_{VS} (q_{VS} - q_S). \quad (41)$$

Ha feltételezzük, hogy $\lambda_{1V} \cong \lambda_{VS} = \lambda$, a hőmérséklet függvényében állandó, ε bevezetésével (41) a

$$\Delta q = \lambda q_V [C_{1V} + \varepsilon C_{VS}] \quad (42)$$

alakra hozható. Alkalmazva a (9) és (10) Lomer formulákat, C_{1V} és C_{VS} kifejezésére, valamint S_B^{VS} -t zérusnak véve, Δq -ra a következő kifejezést kapjuk:

$$\Delta q(T_Q) = \lambda q_V \exp\left\{\frac{S_F^{1V}}{k}\right\} \exp\left\{-\frac{E_F^{1V}}{kT_Q}\right\} \cdot \left(1 - ZI + \varepsilon ZI \exp\left\{\frac{E_B^{VS}}{kT_Q}\right\}\right). \quad (43)$$

A fenti egyenlet logaritmusának $1/T_Q$ szerinti deriváltja:

$$\frac{d(\ln \Delta q)}{d(1/T_Q)} = -\frac{1}{k} \left[E_F^{1V} - \frac{E_B^{VS} \varepsilon ZI \exp\left\{\frac{E_B^{VS}}{kT_Q}\right\}}{1 - ZI + \varepsilon ZI \exp\left\{\frac{E_B^{VS}}{kT_Q}\right\}} \right] \quad (44)$$

Eredményünk szerint a befagyasztott ellenállásnövekedések logaritmusát $1/T_Q$ függvényében ábrázolva egyenest kapunk. Az egyenes meredekségéből E_F^{1V} meghatározható. Bauerle és Koehler [40] elsőként végeztek ilyen jellegű mérést arany mintákon (9. ábra). A kísérlet során $0,4$ mm átmérőjű Au-huzalt edzetek le 5×10^4 K/s hűtési sebességgel sós vízbe. Eredményük a

$$\Delta q(T) = 4,9 \times 10^{-4} \exp\left\{-\frac{0,98 \text{ eV}}{kT}\right\} \Omega \text{ cm} \quad (38)$$

kifejezéssel adható meg. Megbecsülték az olvadásponti vakanciakonzentrációt is, ezt 6×10^{-4} -nek találták. Néhány további fémre a 3. táblázatban tüntettük fel a fenti eljárással meghatározott képződési energiát.

I szennyező koncentrációjú, híg ötvözet fajlagos ellenállása alacsony hőmérsékleten:

$$q(T) = q_0(T) + I q_S. \quad (39)$$

Magas hőmérsékletre való befagyasztás után monovakanciák és vakancia szennyező párok

amiből látható, hogy $\ln \Delta Q$ most nem lineáris függvénye $1/T_Q$ -nek. A befagyasztási kísérletek tanúsága szerint a mért $\ln \Delta Q$ értékek $1/T_Q$ függvényében azonban jó közelítéssel egyenesen helyezkednek el. Bevezetve a

$$\frac{d(\ln \Delta Q)}{d(1/T_Q)} = -\frac{E_F^*}{k} \quad (45)$$

egyenlet által meghatározott E_F^* látszólagos képződési energiát, (44) felhasználásával fck fémekre:

$$E_F^{1V} - E_F^* = \Delta E = \frac{12\varepsilon I E_B^{VS} \exp\left\{\frac{E_B^{VS}}{kT_Q}\right\}}{1 - 12I + 12\varepsilon I \exp\left\{\frac{E_B^{VS}}{kT_Q}\right\}}. \quad (46)$$

Ismerve a vakancia képződési energiáját tiszta fémekben, E_F^* méréséből (46) segítségével meghatározható a vakancia szennyező pár kötési energiája (5. táblázat).

5. TÁBLÁZAT

Vakancia-szennyező kötési energiája, entrópiája híg alumínium ötvözetekben [38]

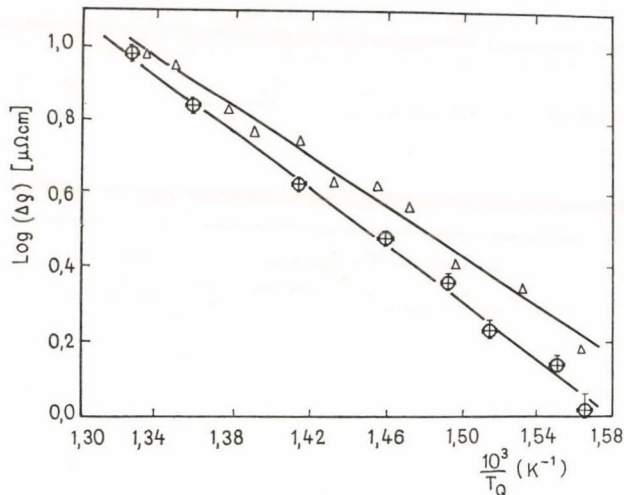
Szennyező koncentráció (at. %)	E_B^{VS} (eV)	S_B^S/k
Al—Si (0,05, 0,10, 0,13)	$0,07 \pm 0,01$	$-(1,7 \pm 0,5)$
Al—Mg (0,11, 0,21, 0,32)	$0,04 \pm 0,01$	$-(2,7 \pm 0,2)$
Al—Zn (0,05, 0,10, 0,20)	$0,02 \pm 0,01$	$-(4,0 \pm 0,2)$
Al—Ag (0,04)	$\sim 0,01$	~ -5

Duckworth és Burke [45] alumínium-indium (46 ppm) ötvözetben végzett mérését mutatja a 10. ábra. Zónafinomított alumíniumban E_F^V -re $0,76 \pm 0,03$ eV-ot kaptak. Az indiumötvözetben a vakancia látszólagos képződési energiája $0,65 \pm 0,04$ eV-nak adódott. Az átlagos befagyasztási hőmérsékletet 440°C -nak vették, és ábrázolták a (46) egyenlet jobb oldalát ε és E_B^{VS} függvényében (11. ábra). Azt találták, hogy a kötési energia nem függ lényegesen az ε értékétől. A vakancia indium atom kötési energiája $0,42 \pm 0,04$ eV-nak adódott. Hasonló jellegű mérések találhatók híg alumínium ötvözetekre a [34] (Al—Mg, Al—Si, Al—Zn), [45] (Al—In, Al—Mg), [46] (Al—Mn), [47] (Al—Li) dolgozatokban.

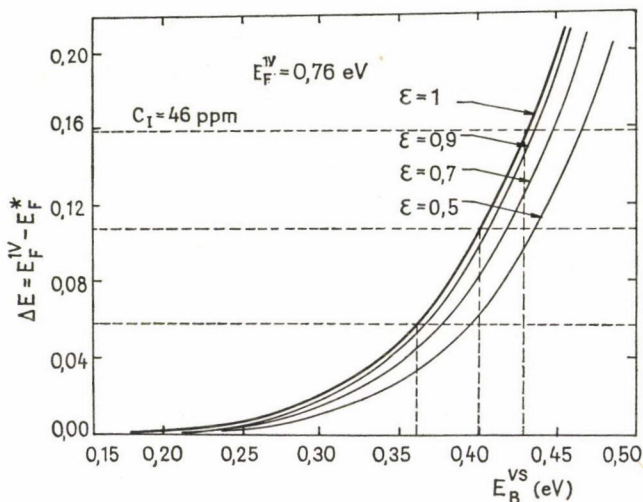
A képződési, kötési energia meghatározásának e fenti módszerei eléggé elterjedtek. A kísérletek elvégzését és az eredmények kiértékelését azonban számos nehézség kíséri. Néhány e problémák közül:

1. A befagyasztott vakanciák által okozott ellenállásnövekedés igen kicsiny, ami nagy pontosságú mérést tesz szükségessé. Alumínium esetében olvadáspont közeléből történő edzésnél a cseppfolyós nitrogénben mért ellenállásváltozás a minta ellenállásának ~ 5 – 10% -a.

2. Az edzés során fellépő belső feszültségek hatásának csökkentése céljából ezekben a kísérletekben csak vékony huzalok vagy lemezek használhatók [34]. A befagyasztást a minta méretének megváltozása kíséri (lásd 8. ábra), amit a mérés kiértékelésekor figyelembe kell venni [34, 36] (mintaméret-korrekción).



10. ábra. Befagyasztott hibáktól származó kezdeti ellenállásnövekedés zónafinomított Al-ban (⊗) és Al—46 ppm In ötvözetekben (Δ) [45]



11. ábra. Az E_F^* látszólagos képződési energia, mint a vakancia-szennyező kötési energiájának függvénye [45]

3. A kísérletek azt mutatják [34, 36, 38], hogy az így nyert képződési, kötési energia értékek a minta méreteitől, valamint a hűtőközeg minőségétől is függenek. Takamura szerint [34] tiszta alumíniumban

$$E_F^V[d] = E_F^V[0] - bd^2 \quad (47)$$

alakban adható meg, ahol $E_F^V[0]$ és b állandók, d pedig a huzal átmérője.

4. Az alkalmazott hőkezelések során a befagyasztás közben, illetve utána a szennyező atomok csoportosulhatnak, ezáltal megszűnik az ötvözet szilárd oldat jellege, elveszti érvényességét a Lomer összefüggés is.

5. Az ε és λ paraméterek ismeretlen értéke a következtetések megbízhatóságát, pontosságát lényegesen befolyásolhatja.

9. BEFAGYASZTOTT VAKANCIÁK ELTŰNÉSE FÉMEKBEN

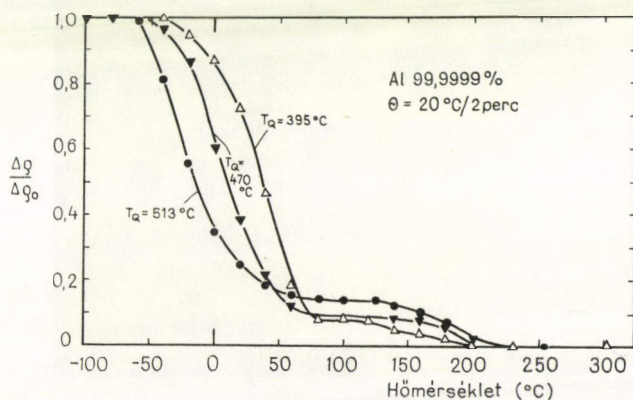
A kristályban levő vakanciák a befagyasztás után a környező nyelőkhöz vándorolhatnak, ha a vizsgált minta hőmérséklete kellően magas és eltűnhetnek azokon. Ilyen vakancianyelő lehet egy diszlokáció, szemcsehatár, meglevő vakanciacsoport, vagy a minta szabad felülete. Ötvözetekben a szennyező atomok befoghatják a mozgó vakanciákat és lerögzíthetik azokat. A vakanciák eltűnési folyamataiban tehát igen lényeges ismerni ezeknek a nyelőknek vagy rögzítési centrumoknak a tulajdonságait, valamint térbeli elhelyezkedésüket és koncentrációjukat. A szabad felület, a szemcsehatárok hatása rögzített számú nyelót jelent, míg a kondenzálódott diszlokációhurkok és üregek esetében ez nem teljesül [28].

Az eltűnési folyamatok tanulmányozása többnyire ellenállásmérésen keresztül történik, az eredményeket gyakran kísérik elektronmikroszkópos vizsgálatok.

10. IZOKRON HŐKEZELÉSEK

A növekvő hőmérsékleteken meghatározott idejű (izokron) hőkezelésekkel vizsgálhatók azok a hőmérséklet tartományok, amelyekben különböző hibák által okozott többletellenállás eltűnik. A lejátszódó folyamatok aktiválási energiája utal arra, hogy milyen jellegű eltűnési mechanizmus megy végbe a kristályban az egyes hőmérséklet tartományokban.

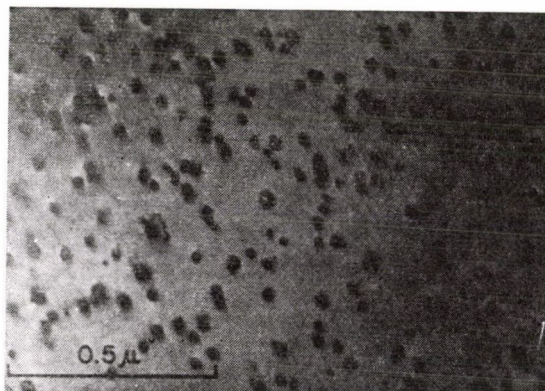
Doyama és Koehler [48] nagytisztaságú (99,9999%) alumínium huzalon végzett izokron megújulási vizsgálatának eredményét mutatja a 12. ábra. A minta hőmérsékletét a befagyasztás után 2 percenként 20 °C-al növelték, ellenállását cseppfolyós



12. ábra. Izokron megújulási görbék alumíniumban [48]

héliumban mérték. A megújulás során két, jól elkülöníthető szakaszt találtak, ez megfelel annak, amit *Panseri és Federighi* [49] is észleltek. Az első szakasz 0°C körül helyezkedik el, és a befagyasztási hőmérsékletet növelve ez a tartomány balra, az alacsonyabb hőmérsékletek felé tolódik el. A minta többletellenállásának nagyobb része eltűnik ebben a tartományban. A második megújulási lépcső 190°C körül található. A két lépcső között a megújulási görbének egy vízszintes szakasza húzódik, amely az edzési hőmérséklet növelésével egyre feljebb kerül. A befagyasztási hőmérséklet csökkentésével viszont elérhető, hogy a második megújulási lépcső gyakorlatilag eltűnjön. Hasonló kétlépcsős eltűnés még számos fém esetében tapasztalható [50–53].

Alumínium esetében *Federighi* [50] feltételezi, hogy az első lépcsőben megindul a vakanciák, divakanciák, kis vakanciacsoportok termikusan aktivált mozgása. A befagyasztási hőmérséklet növelése a kristályban levő kondenzációs magok (diszlokációk, kis üregek) számának növelésével jár, ami azt eredményezi, hogy a hibák kezdeti eltűnési sebessége, ezáltal a kezdeti ellenálláscsökkenés gyorsabb lesz. Magasabb hőmérsékletre történő edzésnél a befagyasztás után a divakanciák és a kis csoportosulások száma is nagyobb lesz. Mivel ezeknek a mozgási aktiválási energiájuk kisebb mint a vakanciáké, várható, hogy T_Q növelésével az eltűnési folyamat alacsonyabb hőmérsékleten kezdődik, azaz az első eltűnési lépcső balra tolódik. A kondenzációs magok számának növekedése a befagyasztási hőmérséklet emelésével azt eredményezi, hogy az első lépcsőben történt hőkezelések során a vakanciáknak egyre nagyobb hányada kondenzálódik ezeken a magokon. A vakanciakondenzáció eredményeként diszlokációhurkok, üregek jönnek létre, amelyek ezen a hőmérsékleten még gyakorlatilag mozdulatlanok. Valószínű, hogy ezeknek a kondenzációs képződményeknek az ellenállásjáruléka észlelhető az eltűnési görbe vízszintes szakaszán, amikor a többletvakanciák diffúziója gyakorlatilag már megszűnt. Várható az is, hogy ezek ellenállásjáruléka koncentrációjukkal arányos, azaz magasabb edzési hőmérséklet esetén ez a vízszintes szakasz feljebb helyezkedik el. A megújulási folyamat második szakaszában e kondenzációval létrejött képződmények eltűnése játszódik le (13. ábra).



13. ábra. Diszlokációhurkok 99,999% tisztaságú alumíniumban [6]

11. IZOTERM HŐKEZELÉSEK

Az izoterm mérések a hibák mozgásáról és eltűnéséről egy adott hőmérsékleten adnak információt. Tekintsük azt az egyszerű esetet, amikor egy tiszta fémekben csak vakanciák vannak jelen és eltűnésük diszlokációkon, szemcsehatárokon megy végbe. Ez többnyire megvalósul, ha a befagyasztási hőmérséklet nem túl magas. Ha eltekin-tünk a vakanciacsoportosulásoktól, az eltűnési folyamat egy egyszerű diffúziós prob-lémává válik, amelyben a nyelők koncentrációját állandónak tekintjük, így az idő-egység alatt eltűnő vakanciák száma arányos a pillanatnyi koncentrációval:

$$\frac{dC_V}{dt} = -K[T]C_V, \quad (48)$$

ahol K reakciósebességi állandó, amely független C_V -től. K értéke a T hőkezelési hő-mérséklettől a

$$K[T] = K_0 \exp \left\{ -\frac{E_M^V}{kT} \right\} \quad (49)$$

Arrhenius egyenleten keresztül függ, ahol E_M^V a vakanciák mozgási aktiválási energiája. A (48) egyenlet megoldása:

$$C_V[t] = C_V[0] \exp \{-K[T] \cdot t\}, \quad (50)$$

amely egy egyszerű exponenciális vakancia eltűnést ír le. Egy adott hőmérséklethez tartozó

$$\frac{\Delta q[t]}{\Delta q[0]} = \frac{q_V C_V[t]}{q_V C_V[0]} = \frac{C_V[t]}{C_V[0]} \quad (51)$$

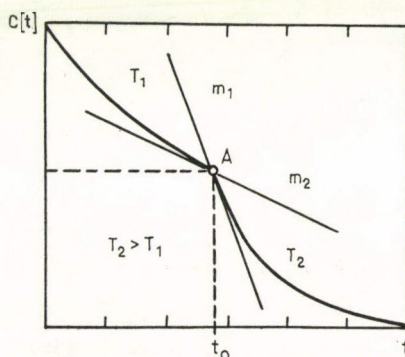
relatív ellenállásváltozás logaritmusát ábrázolva a t hőkezelési idő függvényében egyenest kapunk. Az egyenes meredekségéből $K[T]$, különböző hőmérsékleteken mért $K[T]$ értékekből E_M^V meghatározható.

Gyakran alkalmazzák E_M^V meghatározására a kétlépcsős öregítés módszerét. A T_1 hőmérsékleten levő minta hőkezelését t_0 idő elteltével egy $T_2 > T_1$ értéken folytatják (14. ábra). Az eltűnési görbének töréspontja van a t_0 pillanatban, és ebbe a pontba húzott érintő egyenesek iránytangenseinek m_1/m_2 há-nyadosára a (48) egyenletből

$$\ln \left(\frac{m_1}{m_2} \right) = -\frac{E_M^V}{k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \quad (52)$$

adódik, amiből E_M^V kiszámítható.

Arany esetén az izokron hőkezelések az alumíniumhoz hasonlóan kétlépcsős megújulást mutatnak [53]. Az első lépcső 100 °C alatt található, az itt elvégzett izoterm mérésekből E_M^V meghatározható. 800 °C feletti befagyasz-tásoknál elektronmikroszkópos felvételeken



14. ábra. Aktivációs energia meghatározása a meredekség változtatásának módszerével

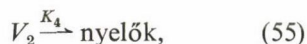
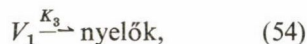
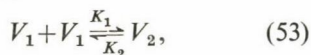


15. ábra. Tetraéderes rétegződési hibák, 960 °C-ról 0 °C-ra leedzett nagytisztaságú (99,999 %) aranyban, 100 °C-os öregítés mellett [6]

megfigyelhetők az első lépcsőben vakanciakondenzációval kialakult tetraéderes rétegződési hibák [6, 7] (15. ábra).

A 16. ábrán egy egyszerű, elsőrendű kinetika vizsgálat látható 0,4 mm átmérőjű arany huzalon [54]. A befagyasztás minden esetben 700 °C-ról történt, így a szabad vakanciák koncentrációja kisebb volt mint 10^{-5} . A vakanciák mozgási aktiválási energiájára $0,84 \pm 0,03$ eV adódott.

Nagytisztaságú fémekben az eltűnési folyamatokat *Damask* és *Dienes* igen részletesen tárgyalták [28]. Magasabb befagyasztási hőmérsékleteknél számolni kell a viszonylag gyorsan mozgó, kis hibahalmazok hatásával is. Ha csak a vakanciák és a divakanciák hatását vesszük figyelembe és feltételezzük (a kémiai reakcióegyenletek mintájára), hogy az alábbi reakciók mehetnek végbe:

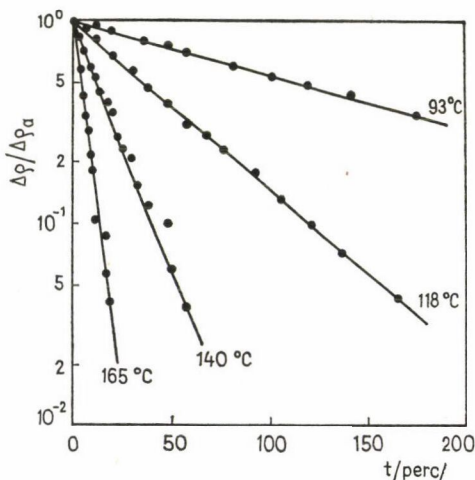


akkor az eltűnési folyamat egy nem-lineáris differenciálegyenletrendszerrel írható le. Az egyenletrendszer:

$$\frac{dV_1}{dt} = K_2 V_2 - K_1 V_1^2 - K_3 V_1, \quad (56)$$

$$\frac{dV_2}{dt} = \frac{1}{2} K_1 V_1^2 - \frac{1}{2} K_2 V_2 - K_4 V_2, \quad (57)$$

ahol V_1 , V_2 a vakanciák, ill. divakan-



16. ábra. Izoterm eltűnési görbék 700 °C-ról leedzett aranyban [54]

ciák koncentrációja, K_1, K_2, K_3, K_4 pedig reakciósebességi állandók:

$$K_1 = 84\nu \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V}}{kT} \right\}, \quad (58)$$

$$K_2 = 14\nu \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V} + E_B^{2V}}{kT} \right\}, \quad (59)$$

$$K_3 = \alpha\nu\lambda^2 \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V}}{kT} \right\}, \quad (60)$$

$$K_4 = \alpha\nu\lambda^2 \exp \left\{ -\frac{E_M^{2V}}{kT} \right\}, \quad (61)$$

E_B^{2V} és E_M^{2V} a divakanciák kötési illetve mozgási aktiválási energiája, α a nyelők koncentrációja, λ egy ugrás átlagos távolsága, $\nu \cong 10^{13}/s$. Az (56), (57) egyenletrendszer numerikus megoldásához szükség van a V_1 és V_2 kezdeti értékére, amely elsősorban a T_Q befagyasztási hőmérséklet függvénye. A kapott megoldást összehasonlítva a mérési eredményekkel, következtetni lehet az egyenletrendszerben szereplő állandók (pl. E_M^{1V} , E_M^{2V} , E_B^{2V}) értékeire. A továbbiakban megvizsgálunk két egyszerű esetet.

a) Az izokron hőkezelésekből az várható, hogy magas befagyasztási hőmérsékletnél az eltűnési folyamat a divakanciák mozgásával indul meg, mivel ezek mozgási aktiválási energiája kisebb, mint az egyes vakanciáké. Ha tehát a mintát izoterm hőkezelésnek vetjük alá olyan hőmérsékleten, ahol az egyes vakanciák gyakorlatilag még mozdulatlanok, akkor az eltűnés kinetikája pusztán az (55) reakcióval jellemezhető. Az ennek megfelelő egyenlet:

$$\frac{dV_2}{dt} = -K_4[T]V_2, \quad (62)$$

ami egy elsőrendű kinetikát határoz meg. Ebből E_M^{2V} , az előzőekben ismertetett, E_M^{1V} -hez hasonló módon értékelhető ki. Doyama és Koehler [48] alumíniumban, -50°C és -60°C -on végzett kétlépcsős öregítés módszerével E_M^{2V} -re $0,50 \pm 0,04$ eV-ot kaptak, ami jól egyezik más szerzők hasonló eredményeivel [36, 55].

b) A befagyasztott minta hőmérsékletének emelésével a monovakanciák mozgása is megindul. Damask és Dienes [28] feltételezték, és numerikusan is igazolták, hogy egy magasabb eltűnési hőmérsékleten a divakanciák száma csak lassan változik,

azaz $\frac{dV_2}{dt} \cong 0$. Ezt felhasználva az (56)–(61) egyenletekből

$$V_2 = \frac{K_1 V_1^2}{K_2 + 2K_4} \cong \frac{K_1}{K_2} V_1^2 \quad (63)$$

adódik. A minta ellenállásának változása a teljes vakanciakoncentráció (N) időegység alatti megváltozásával egyenlő. (Itt hallgatólagosan feltételeztük, hogy $q_{2V} = = 2q_V$!). Kellően magas hőmérsékleten $V_2 \ll V_1$, és így

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d(V_1 + 2V_2)}{dt} \cong \frac{dV_1}{dt}. \quad (64)$$

Az (56) és (57) kifejezésekből viszont

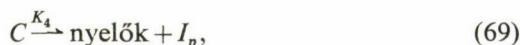
$$\frac{dN}{dt} = -K_3 V_1 - 2K_4 V_2. \quad (65)$$

A reakcióállandók, valamint (63)-ból V_2 értékét behelyettesítve a fenti egyenletbe:

$$\frac{dN}{dt} = -\alpha v \lambda^2 \left[N \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V}}{kT} \right\} + N^2 \cdot 7 \exp \left\{ \frac{E_B^{2V} - E_M^{2V}}{kT} \right\} \right]. \quad (66)$$

Ez a másodrendű kinetika alkalmas arra, hogy E_M^{1V} , E_M^{2V} ismeretében a divakanciák kötési energiájára információt kapjunk.

A kristályban levő szennyező atomok hatását az eltűnési folyamatokra sok szerző vizsgálta. Igen részletes és sokoldalú elemzések találhatók a következő munkákban [28, 34, 56, 57, 58]. A nagy tisztaságú (de nem zónafinomított) fémek 10^{-4} – 10^{-5} koncentrációban tartalmaznak idegen atomokat. A vakanciák elnyelődése általában 10^6 – 10^8 ugrás után következik be, ezért várható, hogy eltűnésükig találkoznak szennyező atomokkal. A korábbiakban már volt szó arról, hogy ezek a szennyezők rögzíthetik a mozgó vakanciákat és egy pár képződik. Ez a pár többnyire lassabban mozog, mint egy vakancia, de várhatóan gyorsabban, mint a szennyező atomok. A párok és a szabad vakanciák nyelőkhöz történő diffúziója fogja elsősorban meghatározni az eltűnési folyamatot, ami a következő reakciókkal jellemezhető:



ahol I a szabad szennyező atomok, C a párok (komplexek), I_p a nyelőkön precipitált atomok koncentrációja. K_1 , K_2 , K_3 , K_4 jelentése a korábbiakból már ismert. A kinetikát leíró egyenletrendszer:

$$\frac{dV}{dt} = K_2 C - K_1 I V - K_3 V, \quad (70)$$

$$\frac{dC}{dt} = K_1 I V + K_2 C - K_4 C, \quad (71)$$

ami a kezdeti feltételek ismeretében numerikusan megoldható.

A megoldás elemzése azt mutatja, hogy kezdetben egy néhány másodpercig tartó gyors folyamat játszódik le, amelyben a vakanciák száma rohamosan fogy, a párok száma pedig nő. A tranziens állapot megszűnésével a párok száma csak lassan csökken, és a teljes vakanciakoncentráció exponenciális csökkenést mutat. Damask

és Dienes [28] stacionárius közelítéssel $\left(\frac{dC}{dt} \cong 0 \right)$ élve, a (70), (71) egyenletek megoldására az

$$N[t] = N[0](1 + I_0 K_1/K_2) \exp \{-K_e t\} \quad (72)$$

1 ifejezést kapta. I_0 a szennyezők koncentrációja a mátrixban,

$$K_e = \frac{K_3 + I_0 K_4 (K_1/K_2)}{1 + I_0 (K_1/K_2)}, \quad (73)$$

a (K_1/K_2) értéke pedig fck fémekre (58), (59)-hez hasonlóan:

$$\frac{K_1}{K_2} = 12 \exp \left\{ \frac{E_B^{VS}}{kT} \right\}. \quad (74)$$

Különböző eltűnési hőmérsékletekhez tartozó K_e értékekből, esetleg más és más I_0 szennyező koncentráció mellett, a (73), (74) egyenletekből a vakancia-szennyező atomok kötési energiája meghatározható.

Ha a párok mozgásától eltekintünk, azaz $K_4 \cong 0$, akkor a K_e tényleges sebességi állandó (73)-ból:

$$K_e = \frac{\alpha v \lambda^2 \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V}}{kT} \right\}}{1 + 12 I_0 \exp \left\{ \frac{E_B^{VS}}{kT} \right\}}. \quad (75)$$

Cattaneo és Germagnoli ennek felhasználásával ezüst szennyezők kötési energiájára aranyban 0,3 eV körüli értéket kapott [54]. Abban az esetben, ha

$$12 I_0 \exp \left\{ \frac{E_B^{VS}}{kT} \right\} \gg 1, \quad (76)$$

a (75) egyenlet alakja Arrhenius típusú lesz:

$$K_e[T] \cong \frac{\alpha v \lambda^2}{12 I_0} \cdot \exp \left\{ -\frac{E_M^{1V} + E_B^{VS}}{kT} \right\}, \quad (77)$$

ami azt jelenti, hogy az eltűnési folyamat tényleges aktiválási energiája:

$$E_{\text{eff}} = E_M^{1V} + E_B^{VS}. \quad (78)$$

Ez egyben azt is mutatja, hogy E_M^{1V} pontos meghatározásához igen nagy tisztaságú minták szükségesek, ha pusztán a (48) típusú egyenlettel akarunk dolgozni. Pl. alumínium esetében a vakanciák és szennyező atomok kötési energiáját 0,2 eV-nak véve, E_M^{1V} pontos meghatározása egy $I_0 < 10^{-5}$ tisztaságú mintát igényel.

ÖSSZEFOGLALÁS

Ebben a dolgozatban ponthibák tulajdonságaival foglalkoztunk tiszta fémekben és híg ötvözetekben. Szó volt arról, hogy milyen módszerekkel lehet meghatározni termikus egyensúlyban levő hibák (pl. vakanciák, intersticiálisok) vagy kis hibahalmazok (pl. divakanciák, vakancia-szennyező párok) egyensúlyi koncentrációját. Röviden utaltunk a hibák keletkezését jellemző képződési és kötési energia meghatározásának elméleti módszereire.

A képződési és kötési energia meghatározásának kísérleti módszerei között áttekintettük a termikus egyensúly állapotában használatos leggyakoribb kísérleti módszereket, majd foglalkoztunk

a gyors hűtés során (befagyasztás) túltelítetté váló hibák tulajdonságaival. Megvizsgáltuk, hogy a ponthibák milyen mértékben változtatják meg a fémek elektromos ellenállását, és a befagyasztás utáni ellenállásnövekedésből hogyan lehet meghatározni a képződési és kötési energiát.

A befagyasztás után a ponthibák eltűnhetnek a fémekben meglevő nyelőkön. Ez a folyamat a minta elektromos ellenállásának megváltozását eredményezi. Az eltűnési folyamatra feltételezett modellből nyert eredményeket összehasonlíthatjuk a tényleges, mérési eredményekkel és így a folyamatot jellemző ismeretlen paraméterekre (E_M^{1V} , E_M^{2V} , E_B^{VS} stb.) kaphatunk információt. A dolgozatban részletesen foglalkoztunk ezekkel az eltűnési jelenségekkel és áttekintettük ezeknek a folyamatoknak néhány modelljét.

IRODALOM

1. I. Kovács and H. E. Sayed, J. Mat. Sci. 11, 529, 1976.
2. A. J. Dekker, Solid State Physics, p. 62. 1957.
3. H. Kimura and R. Maddin, Quench Hardening in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1971.
4. K. Schroeder, Vacancies '76, The Metals Society, London, 1977. p. 51.
5. C. Kinoshita and T. Eguchi, Acta Met. 20, 45, 1972.
6. R. M. J. Cotterill, Lattice Defects in Quenched Metals, Academic Press, New York, 1965. p. 97.
7. M. Meshii, Lattice Defects in Quenched Metals, Academic Press, New York, 1965. p. 387.
8. W. M. Lomer, Vacancies and Other Point Defects in Metals and Alloys, Institute of Metals, London, 1958. p. 79.
9. J. E. Dorn and J. B. Mitchell, Acta Met. 14, 70, 1966.
10. M. W. Thompson, Defects and Radiation Damage in Metals, University Press, Cambridge, 1969.
11. M. Doyama and J. S. Koehler, Acta Met. 24, 871, 1976.
12. H. Brooks, Impurities and Imperfections, ASM, Novelty, Ohio, 1955.
13. J. D. Eshelby, Vacancies '76, The Metals Society, London, 1977. p. 3.
14. L. B. Pedersen, Crystal Lattice Defects, 3, 145, 1972.
15. I. Kovács and G. Vörös, Physica, 96B, 111, 1979.
16. M. Doyama and R. M. J. Cotterill, Lattice Defects and Their Interactions, Gordon and Breach, New York, 1967. p. 79.
17. R. Bullough and J. R. Hardy, Phil. Mag. 17, 833, 1968.
18. P. T. Heald, Vacancies '76, The Metals Society, London, 1977. p. 11.
19. O. Takai, R. Yamamoto, M. Doyama and Y. Hisamatsu, Phys. Rev. B10, 3113, 1974.
20. R. Evans, Vacancies '76, The Metals Society, London, 1977. p. 30.
21. C. J. Meehan and R. R. Eggleston, Acta Met. 2, 680, 1954.
22. J. D. Eshelby, J. Appl. Phys. 25, 255, 1954.
23. R. W. Baluffi and R. O. Simmons, J. Appl. Phys. 31, 2284, 1960.
24. R. O. Simmons and R. W. Baluffi, Phys. Rev. 129, 1533, 1963.
25. Y. A. Kraftmakher and P. G. Strelkov, Vacancies and Interstitials in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 59.
26. G. Guarini and G. M. Schiavini, Phil. Mag. 14, 47, 1966.
27. A. Seeger and H. Mehrer, Vacancies and Interstitials in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 1.
28. A. C. Damask and G. J. Dienes, Point Defects in Metals, Gordon and Breach, New York, 1963.
29. R. N. West, Positrons in Solids, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1979. p. 89.
30. A. Seeger, Frontiers in Materials Science: Distinguished Lectures, Marcel Dekker, New York and Basel, 1976. p. 177.
31. G. M. Hood and R. J. Schultz, J. Nuc. Mat. 69—70, 607, 1978.
32. S. M. Kim, W. J. L. Buyers, P. Martel and G. M. Hood, J. Phys. F: Metal Phys. 4, 343, 1974.
33. W. M. Lomer, Progress in Metal Physics, Pergamon Press, London, 1959. p. 225.
34. J. Takamura, Lattice Defects in Quenched Metals, Academic Press, New York, 1965. p. 521.
35. J. Takamura, Acta Met. 9, 547, 1961.
36. K. Furukawa, J. Takamura, N. Kuwana, R. Tahara, and M. Abe, J. Phys. Soc. Japan, 41, 1584, 1976.
37. N. F. Mott and H. Jones, Theory of Metals and Alloys, Dover Publications, New York, 1958. p. 263.
38. J. Takamura, M. Koike, and K. Furukawa, Properties of Atomic Defects in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1978. 738.

39. *J. M. Keller*, *J. Phys. Chem. Solids*, **24**, 1121, 1963.
40. *J. E. Bauerle and J. S. Koehler*, *Phys. Rev.* **107**, 1493, 1957.
41. *W. Schüle, R. Scholz and A. Panzarasa*, Commission of the European Communities, EUR 6246, 1979.
42. *B. Lengeler*, *Phil. Mag.* **34**, 259, 1976.
43. *W. Wycisk, and M. Feller-Kniepmeier*, *Phys. Stat. Sol. (a)* **37**, 183, 1976.
44. *J. S. Zetts and J. Bass*, *Phil. Mag.* **31**, 419, 1975.
45. *F. C. Duckworth and J. Burke*, *Phil. Mag.* **14**, 473, 1966.
46. *V. Singh, D. P. Lahiri and T. R. Ramachandran*, *Scripta Met.* **12**, 213, 1978.
47. *S. Ceresara, A. Giarda and A. Sanchez*, *Phil. Mag.* **35**, 97, 1977.
48. *M. Doyama and J. S. Koehler*, *Phys. Rev.* **134**, 522, 1964.
49. *C. Panseri and T. Federighi*, *Phil. Mag.* **3**, 1223, 1958.
50. *T. Federighi*, *Lattice Defects in Quenched Metals*, Academic Press, New York, 1965. p. 217.
51. *H. E. Sayed and I. Kovács*, *Phys. Stat. Sol. (a)* **24**, K45, 1974.
52. *R. R. Borussa, and B. Lengeler*, *J. Phys. F: Metal Phys.* **6**, 1405, 1976.
53. *M. De Jong and J. S. Koehler*, *Phys. Rev.* **129**, 49, 1963.
54. *F. Cattaneo and E. Germagnoli*, *Phys. Rev.* **124**, 414, 1961.
55. *S. J. Sanderson*, *Metal Science*, **2**, 41, 1976.
56. *M. Doyama*, *Lattice Defects in Quenched Metals*, Academic Press, New York, 1965. p. 1851.
57. *E. Germagnoli*, *The Interaction of Radiation with Solids*, North-Holland, Amsterdam, 1964. p. 240.
58. *K. P. Chik*, *Vacancies and Interstitials in Metals*, North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 183

3. MEGÚJULÁSI FOLYAMATOK BESUGÁRZOTT FÉMEKBEN

VÖRÖS GYÖRGY
ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	403
2. Ponthiba keletkezési mechanizmusok	403
3. Rekombinációs folyamatok besugárzás alatt	407
4. Megújulási folyamatok besugárzott fémekben	408
4.1. A megújulási folyamatok modelljei	410
4.2. Kísérleti eredmények és vizsgálati módszerek	411
5. Összefoglalás	415
6. Irodalom	415

1. BEVEZETÉS

Ponthibákat fémekben három módszerrel állíthatunk elő, edzéssel (2. fejezet), képlékeny alakítással (4. fejezet) és besugárzással. Az előző két módszer hátránya, hogy pl. az edzéssel befagyasztott ponthibák koncentrációja már az edzés alatt változhat, az alakítással előállított ponthibák mellett pedig jelentős mennyiségű diszlokáció is keletkezik a fémekben, amelyek kölcsönhatnak a ponthibákkal és csak együttes hatásuk észlelhető.

Ezek a hátrányok a besugárzásnál nem jelentkeznek. A besugárzással keltett ponthibák koncentrációja széles határok között változtatható a besugárzás időtartamával, legalábbis kis dózisok esetén. A besugárzás elvégezhető alacsony hőmérsékleten (pl. cseppfolyós He-ban), majd a minta fokozatos felmelegítése során észlelhetők a megújulási folyamatok kezdeti szakaszai is. Az előzetesen létrejött hibaszerkezet azonban jelentősen meghatározza a későbbi megújulási folyamatok tulajdonságait. Ezért a besugárzott fémek megújulási folyamatainak áttekintése előtt röviden összefoglaljuk a besugárzás alatt lezajló folyamatokat és ponthiba keltő mechanizmusokat.

2. PONTTHIBA KELETKEZÉSI MECHANIZMUSOK

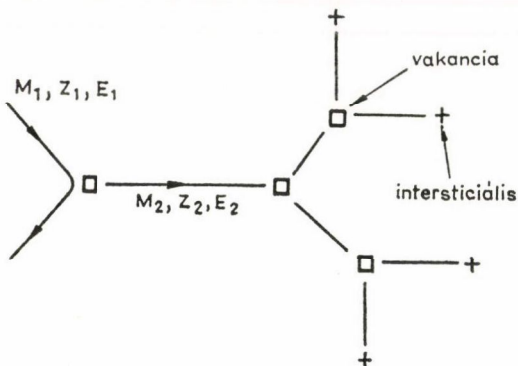
Ha egy M_1 tömegű, Z_1 rendszámú és E_1 energiájú részecske belép egy fémbe, akkor kölcsönhatásba lép valamelyik rácsatommal és elmozdítja a helyéről (1. ábra). Ha E_1 elegendően nagy, akkor a meglökött M_2 tömegű és Z_2 rendszámú atom is olyan számottevő E_2 energiára tehet szert, hogy további ütközések során újabb hibákat hozhat létre. Az ilyen ütközési folyamatokban mindig azonos számban keletkeznek vakanciák és intersticiális atomok. Ezeket Frenkel-pároknak nevezzük.

A hibakeltési folyamat során ismerjük a bejövő részecskék tulajdonságait és Φ fluxusát. Ismertnek tekintjük az első kölcsönhatási mechanizmust, vagyis a szórópotenciált is. Ezekből kell meghatároznunk a keletkezett hibák C_d koncentrációját.

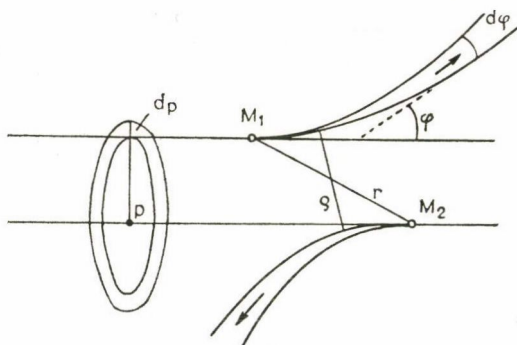
Ehhez felhasználjuk a $\frac{d\sigma}{dE_2}$ differenciális hatáskeresztmetszetet, amely megmutatja, hogy hány helyéről kimozdított atom energiája esik az E_2 energia körüli egységnyi

intervallumba az első ütközés után. Bevezetjük továbbá a $v(E_2)$ roncsolási függvényt, amely megadja, hogy egy E_2 energiával rendelkező mátrix atom hány hibát képes keltetni. Ezek felhasználásával a hiba koncentráció a

$$C_d = \Phi \cdot t \cdot \int_{E_2^0} \frac{d\sigma}{dE_2} v(E_2) dE_2 \quad (1)$$



1. ábra. A sugárzási károsodás folyamata az M_1 bombázó részecske hatására



2. ábra. Az M_1 bombázó részecske szóródása az M_2 mátrix atomon

alakban adható meg [1, 2], ahol t a besugárzás ideje. Az integrálást attól az E_2^0 küszöbenergiától kell kezdeni, amelynél kisebb átadott energia esetén a meglökött atom maradandóan nem mozdul el a helyéről. Ez a küszöbenergia erősen függ attól, hogy a bejövő részecske a kristályhoz képest milyen irányban mozditja ki a rács atomot. Polikristályos anyagokon végzett kísérletek esetén a minimális küszöbenergia használatos és ez kb. 10 eV nagyságrendű [1, 2]. A szórási mechanizmus leírása ionos bombázás esetén klasszikus és kvantum mechanikával, míg elektron és neutron szórás esetén kvantummechanikával történik.

Tömegközépponti koordináta-rendszert használva (2. ábra) [3] a φ

szórási szög függvényében a bombázó részecske által átadott energia

$$E_2 = \Lambda E_1 \sin \frac{\varphi}{2}, \quad (2)$$

ahol

$$\Lambda = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}. \quad (3)$$

A φ eltérülési szög és a p ütközési paraméter közötti összefüggést a klasszikus

pálya számítási módszerekkel a

$$\varphi = \pi - 2 \int_0^{\frac{1}{r}} \frac{du}{\sqrt{\frac{1}{p^2} \left[1 - \frac{V(u)}{E_1} \frac{M_1 + M_2}{M_2} \right] - u^2}}; u = \frac{1}{r} \quad (4)$$

kifejezés adja meg [4]. Itt ϱ a két részecske pályája közötti minimális távolságot jelenti.

A φ és $\varphi + d\varphi$ szögintervallumba szóródó részecskékre a differenciális hatáskeresztmetszet a következő alakú:

$$d\sigma = 2\pi p dp = \pi d(p^2). \quad (5)$$

A $\frac{d\sigma}{dE_2}$ derivált meghatározható a φ szórási szög figyelembevételével:

$$\frac{d\sigma}{dE_2} = \pi \frac{d(p^2)}{d\varphi} \cdot \frac{d\varphi}{dE_2}. \quad (6)$$

A (6) kifejezés utolsó tényezője (2) felhasználásával átírható a következő alakba:

$$\frac{d\sigma}{dE_2} = \pi \frac{d(p^2)}{d\varphi} \{E_2(\Delta E_1 - E_2)\}^{-1/2}. \quad (7)$$

A szórópotenciál ismeretében a (4) kifejezésből $\frac{d(p^2)}{d\varphi}$ kiszámítható és így (7) segítségével megadható az is, hogy mekkora valószínűséggel kerül a szórt részecske energiája az E_2 és $E_2 + dE_2$ közötti intervallumba:

$$P(E_2) = \frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dE_2} dE_2, \quad (8)$$

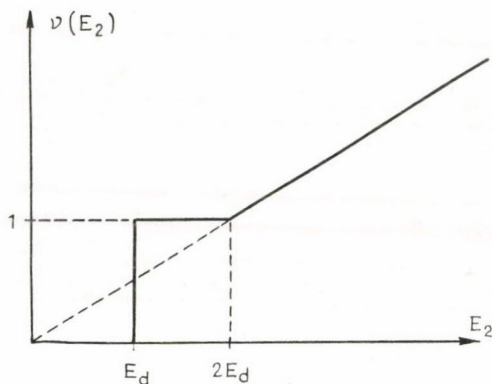
ahol

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{dE_2} dE_2.$$

A $v(E_2)$ roncsolási függvény meghatározására több közelítő módszer ismeretes [5–7]. Ezek közül a legegyszerűbb és ezért leggyakrabban alkalmazott a Kinchin–Pease modell [5]. Ebben a modellben $v(E)$ a következő közelítésekkel határozható meg. Ha a kimozdított atom energiája E_2^0 küszöbenergia alatt van, akkor $v(E_2) = 0$, ha $E_2^0 < E_2 < E_2^0$ közötti érték, akkor $v(E_2) = 1$. Feltesszük továbbá, hogy a kristályt azonos atomok építik fel. Két atom rugalmas gömbszerű ütközése után rendelkezzen az A atom E' a B atom E'' energiával, ezek bekövetkezésének valószínűsége legyen $E^{-1}dE'$ és $E^{-1}dE''$.

Az E energia az E' és E'' összegét jelenti, amely legfeljebb a besugárzó részecske energiájával egyenlő nagyságú lehet, amelyről feltesszük, hogy $E \gg E^0$. Ekkor az A és B atomok által létrehozott további hibák száma:

$$\int_{E^0}^E v(E') \frac{dE'}{E} \quad \text{és} \quad \int_{E^0}^E v(E'') \frac{dE''}{E}. \quad (9)$$



A két kifejezés összege megadja az összes keletkezett hiba mennyiségét, amely a következő alakban írható fel:

$$v(E) = \frac{2}{E} \int_{E_0}^E v(x) dx. \quad (10)$$

A (10) integrálegyenlet megoldása a $v(2E_0)=1$ kezdeti feltétel és az $E \gg E_0$ közelítés esetén a

$$v(E_2) = \frac{E_2}{2E_0^2} \quad (11)$$

3. ábra. Kinchin—Pease roncsolási függvény

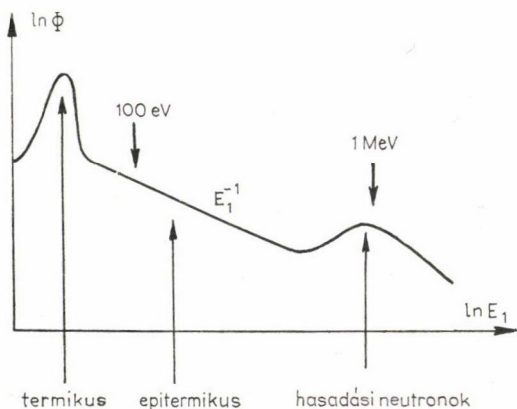
függvénnyel adható meg. A teljes $v(E_2)$ görbe a 3. ábrán látható.

A következőkben áttekintjük, hogy különböző típusú részecskékkel történő besugárzáskor mekkora lehet az átadott energia várható értéke [8].

- Nagyenergiájú (>100 keV) könnyű ionokkal történő besugárzáskor a szórás mechanizmusának leírására Coulomb potenciál használatos. Az ütközéskor átadott energia átlagos értéke $\bar{E}_2 \approx 10^2$ eV.
- Nehéz ionokkal bombázva a mintát az első ütközéskor átadott energia 1—100 keV közötti értékű lehet. Potenciálként r^{-2} -nal változó függvény ad a mérésekkel jól egyező eredményeket.
- Nagyenergiájú (>1 MeV) elektronok Coulomb téren történő szórásának leírására a kvantummechanika apparátusa szükséges. Minden esetben az \bar{E}_2 energiára kb. 10 eV nagyságú értéket kapunk, amely azonos nagyságrendű a küszöbenergiával.
- A 10^2 — 10^6 eV-os gyors neutronok szórását merev gömbök ütközésével modellezzük. Az \bar{E}_2 energia várható értéke

$$\bar{E}_2 = \frac{1}{2} A E_1 \quad (12)$$

nagyságú. A gyakorlatban az átadható energia értéke igen nagy, kb. 50 keV nagyságot is elérhet. A neutron besugárzást általában a termikus reaktorok segítségével hajtják végre. Ez esetben a neutron fluxusnak erős energia függése van, amelyet az (1) kifejezésben a következő



4. ábra. Termikus reaktor neutron fluxusának energiafüggése

$$C_d = t \int_{E_1} \int_{E_2} \Phi(E_1) \frac{d\sigma(E_1)}{dE_2} v(E_2) dE_2 dE_1 \quad (13)$$

alakban vehetünk figyelembe. Tipikus reaktor neutron fluxus látható a 4. ábrán.

- e) A hasadási részek energiája rendkívül nagy, kb. 100 MeV. Szóró potenciálként leárnnyékolt Coulomb potenciál és Born—Mayer potenciál összegét használjuk. Ez a legkoncentráltabban károsító sugárzási fajta, hatáskeresztmetszete igen nagy és gyakorlatilag minden útjába kerülő atomot kimozdít, amelyek azután kaszkád folyamatok sorát indítják meg.

3. REKOMBINÁCIÓS FOLYAMATOK BESUGÁRZÁS ALATT

Az (1) kifejezésből látható, hogy a fluxus és a besugárzás által keltett hibák koncentrációja között lineáris kapcsolat áll fenn. Egységnyi besugárzási időre ez az összefüggés a

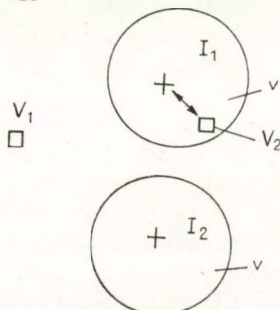
$$\frac{dC_d}{d\Phi} = \sigma_D \quad (14)$$

alakban írható fel. A valóságban ez az egyszerű kapcsolat csak közelítőleg érvényes, nagy besugárzási dózisok esetén pedig egyáltalán nem teljesül. Ennek egyik oka a besugárzás alatt létrejövő spontán rekombináció [1]. Tételezzük fel ugyanis, hogy az anyag már tartalmaz egy V_1-I_1 Frenkel párt (5. ábra). Ha ekkor egy következő bombázó részecske az I_1 körüli v , ún. rekombinációs térfogatban hoz létre egy újabb V_2-I_2 párt, akkor spontán rekombinálódhat I_1 -gyel és így nem növekszik a hibák száma. Részletesebb analízis azt mutatja, hogy ebben az esetben (14) helyett

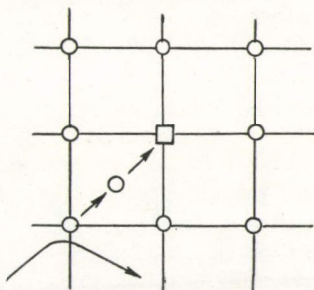
$$\frac{dC_d}{d\Phi} = (1 - vC_d) \sigma_D \quad (15)$$

kifejezés írja le a besugárzási folyamatot [1].

A másik koncentráció csökkentő folyamat az ún. küszöb alatti rekombináció [1]. Ezen folyamat során, pl. elektron besugárzás esetén, a bombázó elektron az E^0 küszöbenergiánál kisebb energiát ad át egy mátrix atomnak és a kölcsönhatásba lép egy, már intersticiális helyzetben levő másik atommal. Ha az első atom a besugárzáskor egy E^s küszöbnél nagyobb energiához jutott, akkor az elegendő lehet ahhoz, hogy a második atom rekombinálódhasson a saját vakancia párjával (6. ábra).



5. ábra. Spontán rekombináció a besugárzás alatt



6. ábra. Küszöb alatti energiával történő rekombináció

A koncentráció csökkenést a

$$\frac{dC_d}{d\phi} = -gC\sigma_s \quad (16)$$

egyenlet írja le, ahol g egynél kisebb állandó és σ_s a küszöb alatti hatáskeresztmetszetet jelöli.

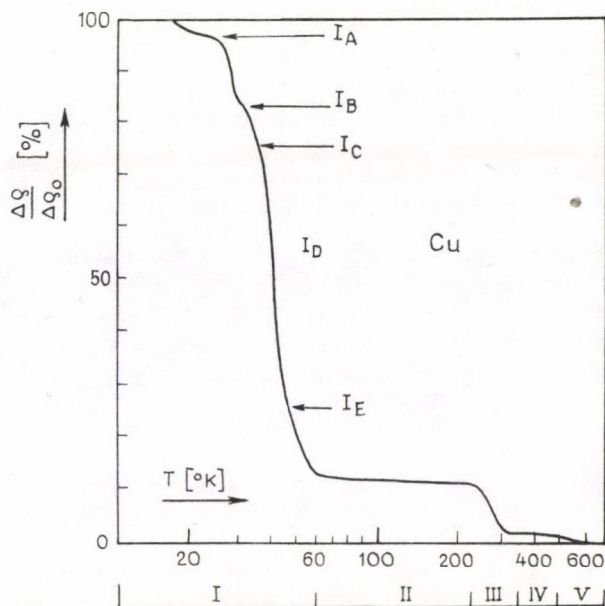
4. MEGÚJULÁSI FOLYAMATOK BESUGÁRZOTT FÉMEKBEN

A besugárzott fémek megújulási folyamatai igen sokrétűek és általában több lépcsőre bonthatók [1, 9]. Ezekben is több folyamat működhet egyidejűleg, pl. Frenkel-párok rekombinációja, intersticiális kiválások keletkezése stb. Ezek az egyidejű folyamatok megnehezítik az intersticiális atomok mozgásának és kölcsönhatásának meghatározását. Ezek ismerete azért fontos, mert az intersticiálisok mozgása szabja meg a megújulási lépcsők egy részének tulajdonságait. Mechanikai deformációk után is megfigyelhetők intersticiális atomokkal kapcsolatos megújulási folyamatok. Ezek értelmezése azonban igen bonyolult feladat [10]. Ezért a besugárzott fémek megújulásának tanulmányozása adja a viszonylag legfontosabb információkat az intersticiális atomok tulajdonságairól.

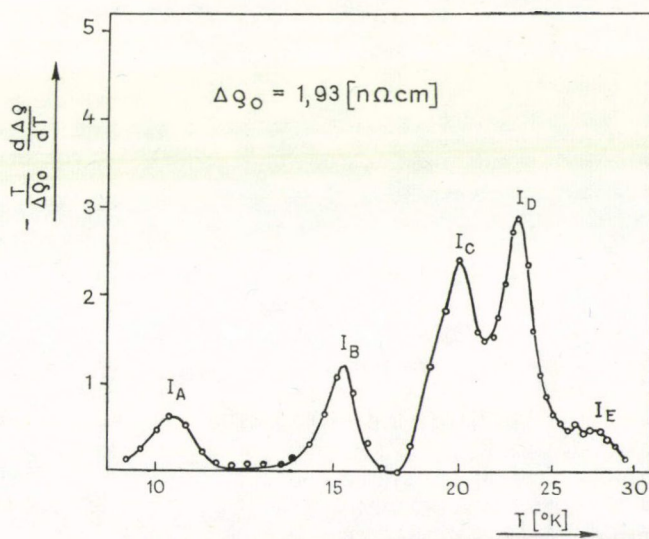
A vizsgálatok középpontjában általában az elektronokkal besugárzott fémek állnak, mert ez a besugárzás adja a legegyszerűbb és a legegyszerűsebb hibaszerkezetet. 4 K hőmérsékleten történő besugárzás után, a keletkező hibák mozgása általában nem aktiválódik, bár pl. Pb, Cd, V és Au esetében már ezen a hőmérsékleten is megkezdődik a hibák mozgása. A besugárzást követő hőkezelés során bizonyos hibák mozgása termikusan aktiválódik. A legegyszerűbb megújulási folyamat az lenne, ha a mozgó hiba (pl. intersticiális atom) megtalálja a viszonylag mozgásképtelen pártját (vakancia) és rekombinálnának. Ez azt jelentené, hogy az ezzel kapcsolatos megújulási folyamat egy adott hőmérsékleten befejeződne. A valóságban azonban mind az intersticiálisok, mind a vakanciák mozgása külön-külön is megfigyelhető. Az egyes folyamatok megértését nehezítő körülmény az, hogy nem ismerünk olyan mérési módszert a hibák koncentrációjának meghatározására, amely független eredményt adna az elrendeződésüktől és állapotuktól. Mindezek eredményeként egy-egy hőkezelési lépcsőben nem csak egy típusú folyamat határozza meg a mért paraméter változását.

Elektronokkal 4 K-en besugárzott Cu izokron megújulási görbéjét láthatjuk a 7. ábrán. Itt a mért paraméter az elektromos ellenállás, amelynek a hibáktól származó járuléka [9] szűnik meg az egyes lépcsőkben.

A görbe különböző részeit I—V-ig szokás számozni. A legtöbb fémen hasonló görbék adódnak a megújulás során, azonban pl. Au, Cd és V hőkezelési görbéiből hiányzik a teljes I. lépcső, míg az Al és Pt megújulása befejeződik a III. szakasz után. Az I. lépcsőt több al-lépcsőre oszthatjuk, ezek jelölése I_A — I_E . Ezek közül csak az I_E mutat erős koncentráció függést. A II. szakasz egyes fémek esetében több kis lépcsőre tagozódik, de ezek jelentősége kicsi. A III. lépcső szintén erősen koncentráció függő. A megújulás nagysága a II. és III. szakaszban a vizsgált fémtől függő. A megújulási görbék lépcsői szemléletesebben jelentkeznek, ha a differenciál hányadost ábrázoljuk a hőmérséklet függvényében (8. ábra).



7. ábra. 4 K-en elektronokkal besugárzott
Cu megújulási görbéje



8. ábra. 4,5 K-en 3 MeV-os elektronokkal bombázott
Pt differenciális izokron görbéje

4.1. A megújulási folyamatok modelljei

Az utóbbi években a besugárzott fémek megújulási folyamatait két alapvető, az ún. „egy és két intersticiális” modell segítségével értelmezik [11–17]. Ezek a modellek a Cu típusú fémek I–III. megújulási lépcsőinek értelmezésére alkalmasak. Mindkét modell megegyezik abban, hogy az I_A – I_C lépcsőket a szoros Frenkel-párok rekombinációjával azonosítja. Ezek esetében a vakancia és az intersticiális atomok olyan közel vannak egymáshoz, hogy a deformációs terük átfedi egymást, vagyis a rekombinációs térfogatuknak van közös része. Termikus aktiválás során az intersticiális irányított mozgással rekombinálódik a saját vakancia párjával.

Az egy intersticiális modellben a termikusan aktivált szabad mozgás az I_D szakaszban kezdődik meg. Itt az intersticiálisok nagy része korrelált mozgás után saját párjával semmisül meg. Azok az intersticiálisok, amelyek nem-korrelált mozgás után más vakanciákkal rekombinálnak, az I_E lépcsőben okoznak változást a mért paraméterben. Az I_E csúcs megjelenési hőmérséklete növekvő hibakoncentrációval csökken, majd megkülönböztethetetlen lesz I_D -tól. Ez azzal magyarázható, hogy növekvő dózissal a Frenkel-párok átlagos távolsága csökken, az intersticiálisok korrelált és nem-korrelált mozgása közötti különbség eltűnik és mindegy lesz, hogy milyen vakanciával rekombinálnak.

Azok az intersticiálisok, amelyek megmaradtak az első lépcső után, szabadon mozogva kötött állapotokat hozhatnak létre szennyezőkkel vagy más intersticiálisokkal a II. lépcsőben. Ugyanakkor a kötött állapotok felhasadnak és a kisebb méretű intersticiális kiválások eltűnésével a nagyobbak növekednek. A III. lépcsőben a monovakanciák is mozgásba jönnek és az intersticiális kiválásokban rekombinálnak, vagy vakancia csoportokat alakítanak ki.

A két fajta intersticiálissal feltételező modellben crowdion típusú metastabil intersticiális atom mozog az I lépcsőben. A szorosan zárt párok rekombinációja után a crowdionokat mozgásuk alapján két csoportra osztjuk. Az „on-line” crowdionok mozgásuk során metszik saját vakanciájuk rekombinációs térfogatát és létrehozzák az I_D csúcst. Más részük, az „off-line” crowdionok az előző folyamatban nem vesznek részt, hanem idegen vakanciákkal semmisülnek meg. A metastabil crowdion elrendeződés termikus aktiválás, vagy más kristályhibák feszültségterének hatására felületencentrált köbös (fcc) fémekben [100], tércentrált köbös (tck) fémekben [110] stabil „dumbbell” típusúvá rendeződik át. Az előző modellhez hasonlóan, növekvő hibakoncentrációval az I_E csúcs kezdetben I_D felé tolódik el, majd további koncentráció növekedésre a crowdion állapot megszűnik. Az I_E csúcs tehát csak kis hibakoncentráció esetén figyelhető meg. Azok a crowdionok, amelyek az első lépcsőben elkerülték a rekombinációt, egymással kölcsönhatva stabil formába rendeződnek és a már kialakult intersticiális kiválásokat növelik. A III. szakaszban a dumbbell intersticiálisok szabadmozgása következik be, majd vakanciákkal rekombinálódva eltűnnek. A szabad vakanciák mozgását ez a modell csak a IV. lépcsőben tételezi fel.

A két modell közötti jelentős különbséget az mutatja a legjobban, ha összehasonlítjuk az I_D és III. lépcsőben mérhető mozgási aktiválási energiákat.

A két modell szerint mindkét esetben intersticiálisok szabadmozgásáról van szó. A rézben mért értékek a következők: $E_{III} \approx 0,71$ eV ($T_{III} \approx 250$ K) és $E_I \approx 0,12$ eV ($T_I \approx 40$ K). Látható, hogy az eltérés lényeges.

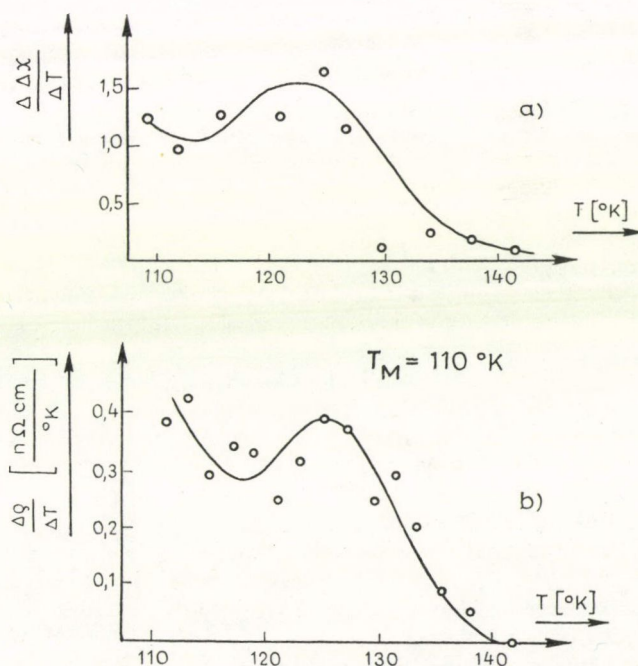
4.2. Kísérleti eredmények és vizsgálati módszerek

Az ismertetésre kerülő vizsgálatokat úgy válogattuk össze, hogy lehetőleg az összes megújulási lépcső vizsgálatára alkalmazott mérési módszerből bemutassunk egy-egy jellemző példát.

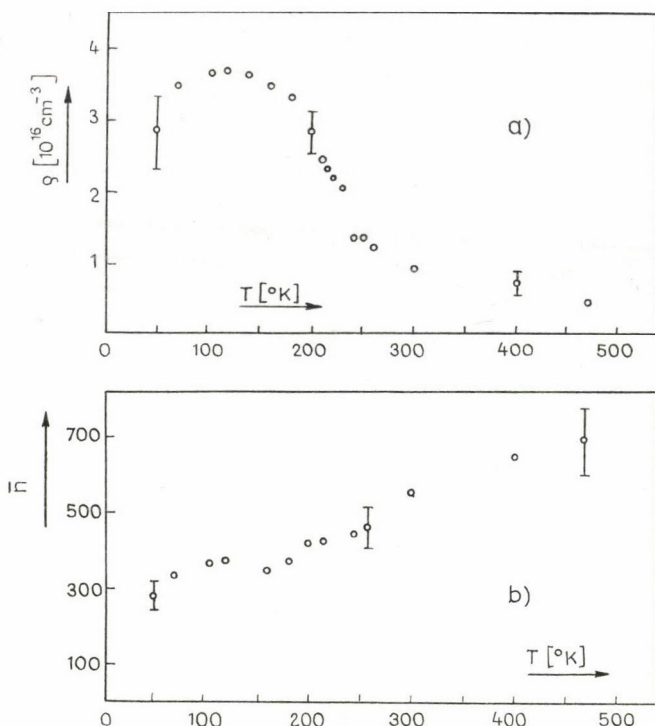
Az [100] típusú dumbbell intersticiálisok elemi ugrásait rugalmas utóeffektus mérési módszerekkel [18] vizsgálták Spiric és munkatársai, 4 K-en elektronokkal besugárzott Al-ban [19]. Megállapították, hogy az I_E és I_D lépcsőben valóban [100], intersticiálisok mozognak 0,115 eV aktiválási energiával. A 9. ábrán elektronokkal besugárzott vason mágneses utóeffektus módszerrel végzett mérések és a párhuzamos ellenállás mérések eredményét hasonlítottuk össze [20]. Mindkét módszer alkalmazásakor 100 és 130 K-en jól definiált csúcs jelenik meg (I_E és I_D) és mindkettőben az intersticiálisok mozgási aktiválási energiája 0,30 eV. A 9. ábrán az I_E csúcs látható a két mérési módszer esetén. A besugárzás hőmérséklete 27 K, és a kezdeti ellenállás, amely a hibakoncentrációra jellemző, 51 nΩm volt.

A mágneses utóeffektus mérése érzékenyebb módszer, mint az először említett rugalmas utóeffektus megfigyelése és ezért kiválóan alkalmas a I_E csúcs detektálására egészen kis koncentrációk esetében is.

A Cu első lépcsőjének részletes analízisét Corbett [21], végezte el. Hasonló vizsgálatot végzett Pt esetében Sonnenberg [22, 23] és Al esetében Simpson és Sosin [24]. Mindegyik vizsgálat arra az eredményre vezetett, hogy a kísérleti eredmények



9. ábra. Vas megújulási görbéjének I_E lépcsője mágneses utóeffektus méréssel (a) és elektromos ellenállás méréssel (b)



10. ábra. Intersticiálisok koncentráció változásának elektronmikroszkópos megfigyelése Cu megújulása során. A megfigyelt hibák sűrűsége (g) az *a*) ábrán, az intersticiális kiválásokban levő atomok átlagos száma (\bar{n}) a *b*) ábrán látható a hőkezelési hőmérséklet függvényében

inkább az egy-intersticiális modell segítségével értelmezhetők. Seeger és munkatársai egy cikksorozatban mutatták meg, hogy a fenti mérések a két intersticiális modellben bevezetett kétféle crowdion típussal ugyancsak értelmezhetők [16, 17, 25—27].

Thompson és Buck [28] Cu γ -sugarakkal történő besugárzáskor megállapította, hogy ha a besugárzás hőmérséklete a II. lépcsőnek megfelelő tartományban növekszik, akkor a diszlokáció-ponthiba kölcsönhatásból származó diszlokáció-rögzítés sebessége élesen csökken. A vizsgálatokat rugalmassági modulusz és belsőúrlódás mérésekkel végezték. Az eredményeket Frank és Seeger [16] úgy értelmezte, hogy az I. lépcső hőmérsékletének közelében történt besugárzás esetén a diszlokációkat crowdionok rögzítik. Emelve a besugárzás hőmérsékletét a crowdionok fokozatosan átalakulnak az ezen hőmérsékleten viszonylag mozgásképtelenebb dumbbellekké és így csökken a rögzítődés növekedésének sebessége. A III. lépcső hőmérsékletét megközelítve a bombázás alatt a diszlokációkat már dumbbellek rögzítik. Későbbi vizsgálatok azonban Thompson és Buck eredményeinél tízszer kisebb modulusz és belsőúrlódás változásokat adtak, hasonló körülmények között [29].

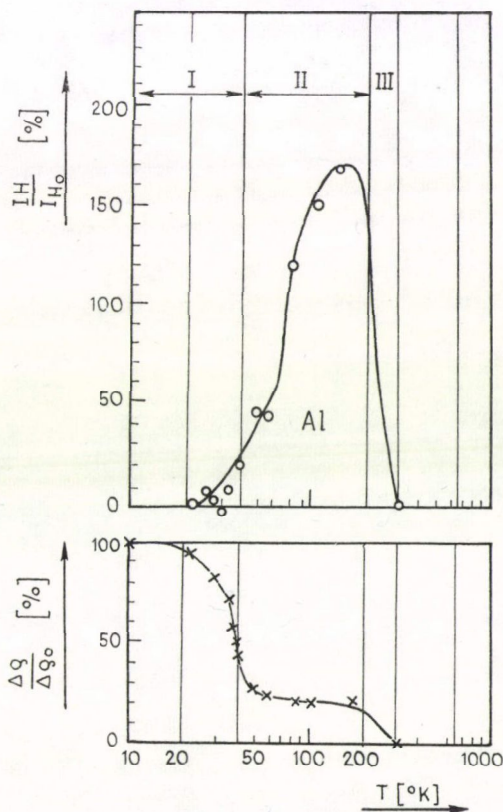
Urbán [30] és Kiritani [31] széleskörű vizsgálatokat folytatott nagyfeszültségű elektronmikroszkóppal az intersticiális kiválások tulajdonságainak tisztázására,

Minden vizsgált anyagban megfigyelték a kiválások megjelenését az első lépcső hőmérséklete felett. Ugyancsak tapasztalták, hogy szennyezők jelenlétében a kiválások száma nő és átlagos méretük csökken. Jaeger és munkatársai 10 K-en 650 keV-es elektronokkal besugárzott Cu minta megújulását vizsgálták nagyfeszültségű elektronmikroszkóppal [32]. Megfigyelték, hogy a kiválások a (111) síkon fekvő kis diszlokáció hurkakként jelentek meg. 50 K alatt kiválás képződést nem figyeltek meg (10. ábra).

Röntgen diffrakciós módszerekkel is eredményesen tanulmányozhatók az intersticiális kiválási folyamatok. A Huang szórás intenzitása (Bragg helyzethez közel levő diffúz röntgen szórás) arányos a kiválások és az egy kiválásban levő atomok számával, valamint négyzetesen függ egy intersticiális okozta elmozdulástól. Merve a minták elektromos ellenállás változását, továbbá a Huang intenzitást (I_H) a kiválások mérete is meghatározható. Ehrhart végzett 4 K-on elektronokkal besugárzott Cu és Al mintákon Huang szóráson alapuló méréseket (11. ábra) [33, 34]. Az ábrából nyilvánvaló, hogy a II. lépcsőben erőteljes kiválás képződés indul meg.

Vogl és Mausel [35, 36] két komponensű Al—Co ötvözetben végzett Mössbauer effektus méréseket. Ezekben a kísérletekben a Co radioaktív izotóp volt, amely Fe-ra bomlott. A Co atomok egy része az Al atomokkal dumbbell-t alkot. Bomlás után Al—Fe dumbbell alakul ki, amely már alkalmas a Mössbauer vizsgálatra. Az intersticiális pozícióban levő Fe új Mössbauer-vonalat hoz létre. A mérések megerősítették a dumbbell konfigurációt.

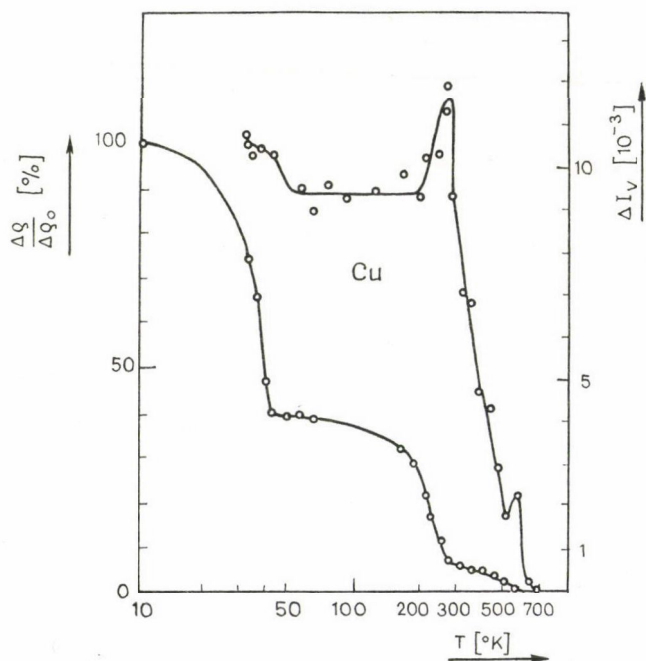
A 70-es években egyre növekvő mértékben alkalmazott mérési módszer a pozitron annihiláció vizsgálata fémekben [37]. A módszer lényege az, hogy az alkalmas forrásból a fémbe lépő pozitron kb. 10^{-12} s alatt lelassul, majd a nagy számban jelenlevő elektronokkal 10^{-10} s időtartamra kötött állapotot hoz létre és ezután két γ -fotonra bomlik. Az e^- , e^+ pár impulzusa természetesen függ attól, hogy az elektron milyen állapotban tartózkodott a kötés létrejöttékor. Ez azt eredményezi, hogy az emmitált γ -foton impulzusa nem esik egy egyenesbe és energiájukban Doppler eltolódás is megfigyelhető. Ezt használják ki a szögkorreláción, vonalprofil analízisen, Doppler-kiszélesedésen és élettartam méréseken alapuló vizsgálati módszerek. A fé-



11. ábra. Al izokon megújulási görbéje Huang-szórással (felső ábra) és elektromos ellenállással mérve (alsó ábra)

mekben lehetséges pozitron állapotokat lyukakkal ellátott laphoz hasonlíthatjuk. A lyukakban foglalnak helyet a pozitív ionok. Ha a fém hibákat tartalmaz, a pozitív töltés eloszlás a hibátlan fémhez képest jelentősen megváltozik. Intersticiális atomok környezetéből pl. ki kell szorítani a pozitron felhőt és ez a pozitronok alapállapotának ~ 5 eV-os megváltozásával jár. A vakanciák esetében hiányzik a pozitív töltésű ion, ezért a pozitronok egy része itt kötött állapotokba kerül. Ugyanakkor azonban itt kicsi az elektronsűrűség és ez más, lokalizált annihilációs paramétereket eredményez, mint a delokalizált elektronokkal történő megsemmisülés. A 12. ábrán elektronokkal 31 K-en besugárzott Cu megújulási görbéjének pozitron annihilációs és ellenállás méréseinek eredményét hasonlítjuk össze [38]. Látható, hogy az I. lépcsőben mindkét mérés csökkenő vakancia koncentrációt jelez. A II. szakaszban az ellenállás csökken, ugyanakkor a vonalprofil paraméter nem. A III. lépcsőben a pozitron annihilációs mérés görbéje csúcsot mutat, az ellenállás a szokásosan csökken. Mint a szerzők is kiemelték, ha feltesszük, hogy a pozitron csapdák ugyanazok mint az I. és II. lépcsőben, akkor a jelenséget csak úgy lehet magyarázni, hogy a III. szakaszban a csapdák valamely más tulajdonsága befolyásolja az eredményeket.

A megújulási folyamatok egy másodlagos jelensége az üregképződés [39]. Ez a jelenség akkor következik be, ha az erős besugárzás hőmérséklete nagyobb, mint a minta olvadáspontjának 0,4-szerese. Ilyen körülmények állnak fenn az atomreaktorok szerkezeti anyagai esetében. Ezért az üregképződés tanulmányozása jelentősen hozzájárul a megfelelő anyagok kiválasztásához. Az eddig ismertetett mérési módsze-



12. ábra. Cu izokron megújulási görbéje pozitron annihilációs vonalprofil paraméter változás méréssel (felső görbe) és elektromos ellenállás méréssel (alsó görbe)

rek bármelyike alkalmas az üregek képződés és növekedés tanulmányozására [39]. Az első pozitron annihilációs szögkorrelációs üreg vizsgálat 1972-ben történt neutronokkal besugárzott polikristályos Mo mintán [40].

A legújabb vizsgálati módszerek közé tartozik a pozitív μ^+ mezon mérési módszer [41]. A vizsgálat lényege, hogy a fémbe érkező polarizált μ^+ lelassul, majd a vakanciák, vagy más kristályhibák felé diffundál. Ezeken a helyeken a μ^+ és kristály között dipól-dipól kölcsönhatás lép fel és ez depolarizálja a μ^+ -t. A depolarizáció mérésével a hibák tulajdonságaira, térbeli elhelyezkedésére következtethetünk.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A besugárzott fémekben fellépő megújulási folyamatokat széles körben, sokféle módszerrel vizsgálták az elmúlt évek során. Az e területen megjelent nagyszámú dolgozat ismeretében sem lehet azonban teljes bizonyossággal dönteni az egyes folyamatok természetéről, így pl. a 3.1. pontban ismertetett két modell között. A döntéshez további vizsgálatok szükségesek, amelyek már más, további új módszerek igényelnek. Ezt a fejlődési irányt jelzik a pozitron annihilációs, μ^+ -os és Mössbauer-effektuson alapuló mérési technikák. Segítségükkel lehetséges, hogy hamarosan jobban megismerjük a besugárzott fémek megújulási folyamatainak természetét.

IRODALOM

1. A. Seeger, D. Schumacher, I. Diehl and W. Schilling, (eds.), Vacancies and Interstitials in Metals, North-Holland, Amsterdam, 1970.
2. M. W. Thompson, Theory of Imperfect Crystalline Solids, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1971. p. 535.
3. L. D. Landau és E. M. Lifsic, Kvantummechanika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1978. 589. o.
4. L. D. Landau és E. M. Lifsic, Mechanika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1974. 70. o.
5. G. H. Kinchin and R. S. Pease, *Rep. of Prog. in Physics*, 18, 1, 1955.
6. R. S. Nelson, E. W. Etherington and M. F. Smith, UKAEA Report, TRG 2152 (D), 1972.
7. M. I. Norgett, H. T. Robinson and I. M. Torrens, AERE Report T. P. 494, 1972.
8. M. W. Thompson, Defects and Radiation Damage in Metals, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1969. p. 119—140.
9. F. W. Joung, *Journal of Nucl. Materials*, 69, 70, 310—330, 1978.
10. I. Kovács and L. Zsoldos, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
11. W. Schilling, G. Burger, K. Isebeck and H. Wenzl, in Ref. [1] p. 255.
12. W. Schilling, P. Ehrhart and K. Sonnenberg, Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals, eds. M. T. Robinson and F. W. Joung, ERDA report Conf., Springfield, Virginia, 1976. p. 410.
13. W. Schilling and K. Sonnenberg, *I. Phys. F: Metal Phys.* 3, 322, 1973.
14. A. Seeger, in Ref. [1], p. 999.
15. A. Seeger in Ref. [12], p. 493.
16. W. Frank and A. Seeger, *Cryst. Lattice Defects*, 5, 141, 1974.
17. W. Frank and A. Seeger, *Radiat. Eff.* 25, 17, 1975.
18. A. S. Nowick and B. S. Berry, *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press, New York, 1972.
19. V. Spiric, L. E. Rehn—H. Robrock and W. Schilling, *Phys. Rev. B.*, in press.
20. H. E. Schaefer, D. Butteweg and W. Dander, in Ref 12 p. 463.
21. I. W. Corbett, R. B. Smith and R. M. Walker, *Phys. Rev.* 114, 1452 and 1460, 1959.
22. K. Sonnenberg, W. Schilling, H. J. Dibbest, K. Mika and K. Schroeder, *Radiat. Eff.*, 15, 129, 1972.
23. H. S. Dibbest, K. Sonnenberg, W. Schilling and U. Dedek, *Radiat. Eff.* 15, 115, 1972.
24. H. M. Simpson and A. Sosin, *Radiat. Eff.* 3, 1, 1970.
25. U. Gösele and A. Seeger, in Ref. [12], p. 539.

26. *A. Seeger and U. Gösele*, Radiat. Eff. 24, 123, 1975.
27. *U. Gösele and W. Frank*, Phys. Status Solidi 13 61, 163, 1974.
28. *D. O. Thompson and O. Buck*, Phys. Status Solidi 37, 53, 1970.
29. *C. Minier, I. Lauzier and S. L. Seifert*, in Ref. [12] p. 963.
30. *K. Urbán*, in Ref. [12], p. 675.
31. *M. Kiritani*, in Ref. [12], p. 695.
32. *W. Jaeger and K. Urban*, Commun. Phys. in press.
33. *P. Ehrhart and W. Schilling*, Phys. Rev. B, 8, 2604, 1973.
34. *P. Ehrhart and U. Schlagheck*, J. Phys. F: Metall Phys. 4, 1575 and 1589, 1974.
35. *G. Vogl, W. Mansel and W. Vogl*, I. Phys. F. 4, 2321, 1974.
36. *G. Vogl and W. Mansel*, in Ref. [12], p. 349.
37. *R. N. West*, Positrons in Solids, ed. P. Hanttojärvi, Springer-Verlag, Berlin, 1979. p. 88.
38. *S. Mantl and W. Trifhäufer*, Phys. Rev. B, 17, 1645, 1978.
39. *R. Bullogh and R. S. Nelson*, Physics in Tech. 5, 12, 1974.
40. *O. Mogensen, K. Petersen, R. M. J. Cotterill and B. Hudson*, Nature, 239, 98, 1972.
41. *K. G. Lynn*, Properties of Atomic Defects in Metals, (eds. N. L. Peterson and R. W. Siegel) North-Holland, Amsterdam, 1978. p. 613.

4. PONTHIBA ELTŰNÉSI FOLYAMATOK ALAKÍTOTT FÉMEKBEN

S. TÓTH LÁSZLÓ
ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	417
2. A ponthibák típusai	418
3. Ponthiba keletkezési elméletek	419
4. Nem egyensúlyi vakancia koncentráció fenntartásához szükséges mechanikai munka	423
5. Deformáció vakancia-áramlással polikristályokban	423
6. Ponthibák elektromos ellenállása	424
7. Megújulási szakaszok általános jellemzése hidegen alakított fémeknél	424
8. A megújulás I. szakasza	425
9. A megújulás II. szakasza	427
10. A megújulás III—IV. szakaszai	429
11. Összefoglalás	433
12. Irodalom	433

1. BEVEZETÉS

A fémek plasztikus alakítása közben a kezdeti hibastruktúra és a hőmérséklet függvényében az anyagban számos új hiba keletkezik, illetve átrendeződik. Az alapvető rácshibák a ponthibák és a diszlokációk. Ha ezek közül csak a ponthibák szerepét kívánjuk elemezni, akkor is számolni kell azzal, hogy megjelenési formájuk sokféle, egyszerre vannak jelen a diszlokációkkal, és ezek között különféle reakciók, kölcsönhatások lehetnek.

A különböző típusú rácshibák hatásának elemzése csak úgy vezethet egyértelmű eredményekre, ha az egyes hatások egymástól jól elválaszthatók. Az úttörő vizsgálatokban ezt a ponthibák különböző aktiválási energiája alapján hőkezeléssel való sították meg.

A ponthibák tulajdonságainak megértésében fontos annak tanulmányozása is, hogy a ponthibák jelenléte hogyan befolyásolja a képlékenységi tulajdonságokat, ezért áttekintjük a ponthiba keletkezési elméleteket is. Ezek legfőbb kérdése az, hogy az alakítás közben keletkezett hibák vakanciák-e, vagy intersticiálisok.

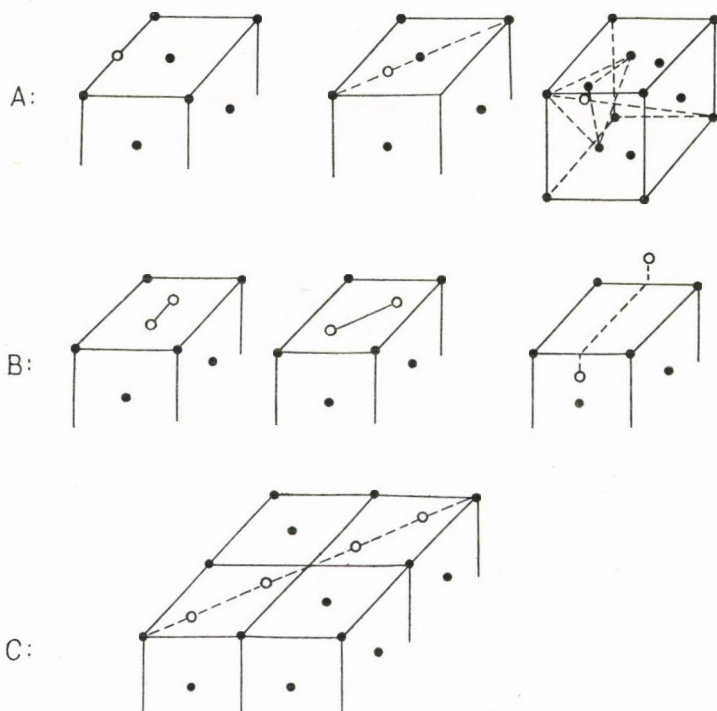
A ponthibák hatása a mechanikai tulajdonságokra többféle lehet. Bár csak diszlokáció elmozdulás okoz képlékeny alakváltozást, de a lépcsőkhöz diffundáló ponthibák megkönnyítik azok nem konzervatív mozgását, ezért a ponthibák alakítási lágyulást is okozhatnak. Megváltozhat a rugalmassági modulusz és a belső súrlódás is [1].

Ponthibákat nem csak képlékeny alakítással, hanem más módon is be lehet vinni az anyagba, pl. befagyasztással (2. fejezet), vagy besugárzással (3. fejezet). A kialakuló hibastruktúra hatása általában tanulmányozható folyásfeszültség mérésekkel, vagy az alakítási keményedés vizsgálatával [2–4], továbbá egyéb fizikai tulajdonságokban, pl. fajlagos elektromos ellenállásban bekövetkező változások mérésével.

2. A PONTHIBÁK TÍPUSAI

Az alapvető hibák a vakanciák, intersticiálisok és a szennyező atomok, de léteznek ezek kombinációi is. Ilyen pl. a Frenkel-hiba, amely egy vakancia és egy intersticiális párból áll. A vakanciák esetén megkülönböztetünk monovakanciát (vagy egyszerűen vakanciát) és divakanciát, ill. vakanciakondenzációt. Az említett hibákat röviden a következőképpen jellemezhetjük [5].

Az intersticiálisok képződési energiája nagyobb mint a vakanciáké, de a mozgási aktiválási energiájuk sokkal kisebb. Az öndiffúzió elsősorban vakanciák segítségével zajlik le. Ha az öndiffúziós aktiválási energiát Q -val jelöljük, a vakanciák képződési energiája kb. $0,55Q$, Cu, Fe, Au és Al esetében. A divakanciák mozgási aktiválási energiája a vakanciáénál kisebb. Valószínű, hogy léteznek nagyobb vakancia-csoportok is, de ezek mozgékonyságának mérése igen nehéz.



1. ábra. Intersticiális konfigurációk fcc fémekben. A: metastabil, B: felhasadt (split), C: crowdion

Az intersticiális atomok többféle egyensúlyi konfigurációban létezhetnek [6]. Eszerint három csoportot különböztetünk meg (1. ábra). Az *A* típus metastabil konfiguráció, amelynek mozgása deformáció után nehezen figyelhető meg. A *B* típus a felhasadt (split) vagy másnéven szulzó forma. Ezek 0,1–0,5 eV mozgási aktiválási energiájúak, a megújulás III. szakaszában figyelhetők meg. A harmadik ún. crowdion típus fcc fémekben a szoros $\langle 110 \rangle$ irányhoz tartozó sztatikus kompresszióval, vagy gyors részecske besugárzással hozható létre (dynamic crowdions) [6–10]. Bár ez a forma instabilnak látszik a szűk mozgástér miatt [8], létezhet metastabil formában. Lehetséges, hogy további stabil konfigurációs formák is léteznek ezeken kívül.

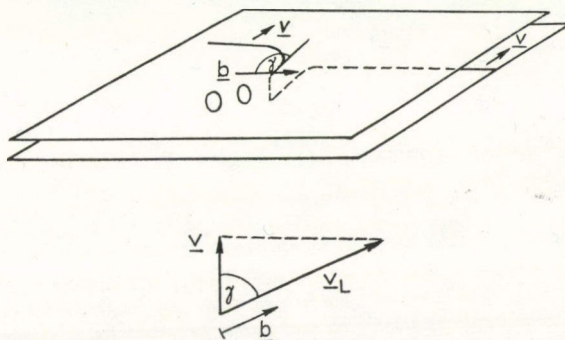
3. PONTHIBA KELETKEZÉSI ELMÉLETEK

A legtöbb elképzelés szerint a ponthibák az alakításnál a diszlokációk mozgása során keletkeznek; vagy a diszlokációkon levő lépcsők nem konzervatív mozgásával, vagy a diszlokáció-szakaszok kölcsönös annihilációjával. Ezeket a modelleket 1962-ig áttekintette *Baluffi és Ruoff* [11], akik megállapították, hogy számos modell alkalmas arra, hogy egymás után zsinórban elhelyezkedő ponthibákat eredményezzen. A képlékeny alakítással létrehozott ponthibák további elméleti modelljeit legutóbb *Kovács és El Sayed* dolgozta fel [1].

Seitz [12] elmélete a nem konzervatív mozgó lépcsőn alapul. Lépcsők keletkeznek a diszlokációkon pl. vakancia, vagy intersticiális elnyeléssel (ezek általában elemi lépcsők), valamint diszlokációk metszésénél. Tekintsünk egy olyan lépcsőt, amely egy diszlokáció csavar jellegű szakaszán van (2. ábra). Az ábrán jelölt lépcsőnek *b* irányába lehet konzervatív mozgása. Ha közben a diszlokáció *v* sebességgel mozog, a további konzervatív mozgáshoz az kell, hogy a γ szög állandó maradjon, vagyis a lépcső sebessége:

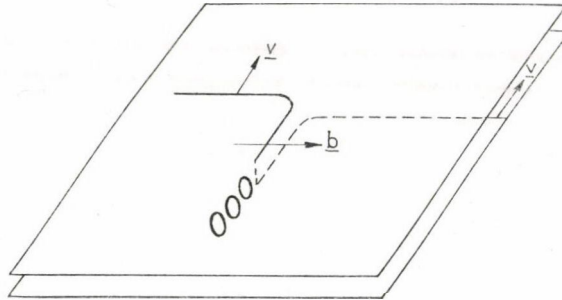
$$v_L = v / \cos \gamma.$$

$\gamma \rightarrow 90^\circ$ esetben $v_L \rightarrow \infty$. v_L növekedésének a fémbe érvényes v_H hangsebesség határt szab, mert $v_L = v_H$ esetén a diszlokáció energiája végtelen nagy lenne. Ezért $\gamma \rightarrow 90^\circ$ esetben a lépcső nem konzervatív mozgást végez, amelynek során ponthibákat emittál. Ez megnöveli a diszlokáció mozgatásához szükséges külső feszültséget.



2. ábra. Diszlokáció nem konzervatív mozgása

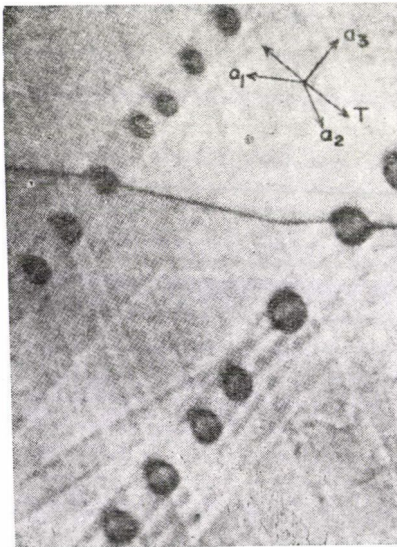
Ha a lépcső nem tud elmozdulni a diszlokáció mentén, két eset lehetséges: vagy egy hosszú diszlokáció-dipól, vagy egy sorozatban ponthiba keletkezik (3. ábra). A dipól le is szakadhat és egy zárt gyűrű alakú diszlokációt képez. Ilyet figyelt meg Price [13] elektronmikroszkóppal. Az alakítási keményedés I. szakaszában a primer



3. ábra. Diszlokáció dipól nem konzervatív mozgása

csúszási rendszerben éldiszlokációk keletkeztek, a szekunderben levő csavardiszlokációk egyes szakaszai pedig kereszcsúszással lépcsőket képeztek és így keletkeztek a leszakadt hurkok (4. ábra, fénykép). Ez a gyűrű alakú diszlokáció végül hőkezeléssel teljesen eltűnik a ponthiba diffúzió következtében.

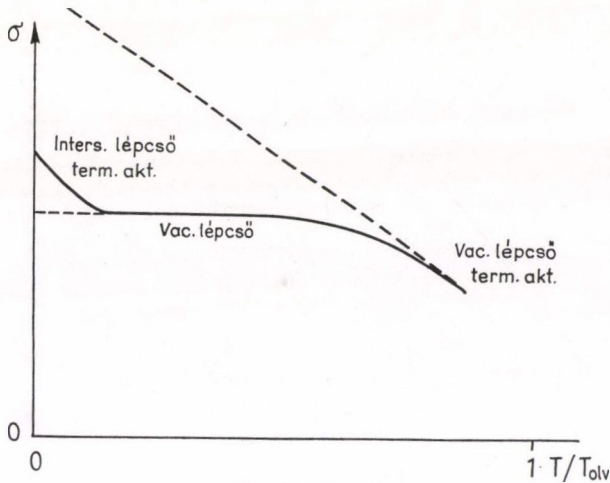
Seitz elmélete nem veszi számításba a termikus energia fluktuáció szerepét. Erre Hirsch [14] és Warrington [15] végeztek vizsgálatokat. Eredményük az, hogy alacsony hőmérsékleten a termikus fluktuációk elhanyagolhatók, és csak a mechanikai erők játszanak szerepet, míg magasabb hőmérsékleten keletkezhetnek ponthibák a termikus fluktuációk segítségével is.



4. ábra. Diszlokáció dipólokból kialakult diszlokáció hurkok Zn-ben [13].

Hirsch [14] vizsgálta az elemi léptékű intersticiális és vakancia lépcsőket. Megállapította, hogy az intersticiális lépcsők általában konzervatívan mozognak a diszlokáció mentén. A vakancia lépcsők viszont könnyebben mozognak nem konzervatívan, miközben ponthibákat termelnek. Az előbbi folyamat könnyen aktiválható termikusan, míg az utóbbi csak magas hőmérsékleten, ahol a termikus fluktuáció a teljes öndiffúziós energiát képes fedezni. Meggondolásait alátámasztja Warrington rézre vonatkozó mérése (5. ábra) [15].

Hogy a lépcsők által termelt ponthibák vakanciák-e, vagy intersticiálisok, még ma is központi probléma. Ha a lépcsők pl. egy mozgó diszlokáció és egy diszlokáció „erdő” átmetszéséből adódnak, Zsoldos szerint [16] vakanciák és intersticiálisok kb. egyenlő számban kelet-



5. ábra. Vakanciák és intersticiálisok mozgásának hatása a folyásfeszültségre

keznek. *Hirsch* szerint [14] a külső feszültség megpróbálja összehúzni az intersticiális lépcsőt, míg a vakanciákat termelő lépcsők kiterjednek és megmaradnak (tehát több vakancia keletkezik). *Weertman* [17] a parciális diszlokációkat vizsgálta egy kettős rétegződési hiba esetén és az ő eredménye szerint is az arány egyforma.

Friedel szerint [18] a nem konzervatíván mozgó lépcső mechanizmus nem ad lényeges járulékot a ponthiba keletkezéséhez. Ezt azzal indokolja, hogy hidegalakítás esetén az ehhez szükségesnél kisebb diszlokáció sebességeket találtak, ezért a lépcsők konzervatíván mozognak a diszlokáció mentén.

Szerinte köbös kristályban lényegesebb mechanizmus az, amikor egy mozgékony diszlokáció-hurok metszi a diszlokáció erdő valamelyik vonzó kölcsönhatású tagját. Ezt a modellt dolgozta ki részletesen *Saada* [19]. Amikor a hurok a vonzó diszlokációt elmetezi, a *Hirsch* reakció [20] szerint a hurok két részre válik, amelyeket egy rögzült diszlokáció csomó köt össze. Ha a diszlokáció Burgers vektora nem párhuzamos a hurok csúszási síkjával, akkor a két szakasz különböző csúszási síkon halad, és valamilyen x kihajlás után egymást metszve rekombinálódnak ponthibák keltése közben. x feltehetően arányos a diszlokáció hálózat átlagos l méretével:

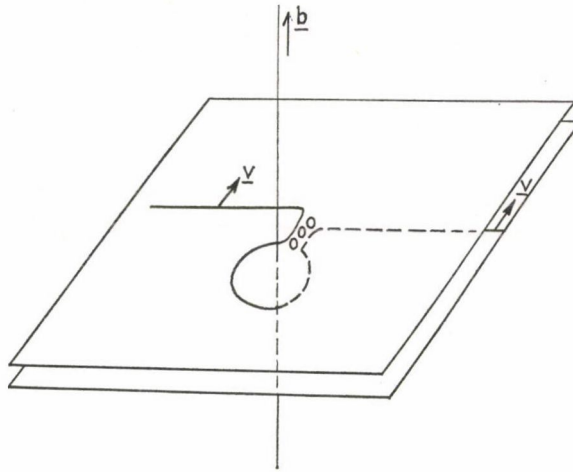
$$x = Al.$$

Ekkor a ponthibák koncentrációja arányos a plasztikus munkával [19]:

$$C \cong \frac{A}{G} \int_0^{\epsilon} \sigma d\epsilon, \quad (1)$$

ahol G a nyírási modulusz, σ a csúsztató feszültség, ϵ az alakváltozás mértéke.

Mott elképzelése [21] lényegében a *Friedel* elmélet egyszerűsített változata, amelyben két egyenes diszlokáció metszi egymást a 6. ábrának megfelelően. A mozgó diszlokáció az álló csavardiszlokáció felé közeledve szükségképpen két részre válik,



6. ábra. Ponthiba keletkezés Mott-féle mechanizmussal

amelyeket egy lépcső választ el egymástól. A kihajlás gyűrű alakú, amelynek összeháródásánál ezek a szakaszok eltűnnek ponthibák keltése közben.

Feltham modelljében [22] a plasztikus deformáció eredménye egy diszlokáció-cella struktúra, amelyben a cella méret csökken az alakítás növelésével. A ponthibákat az egymást metsző lépcsők nem konzervatív mozgása termeli. Ebből adódik, hogy a ponthiba koncentráció (c) és a diszlokáció sűrűség (A) aránya állandó a deformáció során:

$$\frac{c}{A} \approx 20 b^2.$$

Ezt az eredményt a konkrét mérésekkel összehasonlítva *Feltham* egy nagyságrenden belüli egyezést talált az észlelt c/A és $20b^2$ mennyiségek között [23—24].

Az erdő diszlokációkat metsző hurok modell egy másik változata *Kovács*tól származik [25], amely a ponthiba koncentráció növekményre a *Saada*-éval azonos eredményt ad. A modell szerint ugyanis az alakítási keményedés során minden diszlokáció átmetszésénél egy lépcső keletkezik a hurkon és a lépcső tovább mozog a feszültség hatására, minden lépésénél egy ponthibát hagyva maga után. Ezért a ponthiba koncentráció növekmény arányos a lépcsők, vagyis az átmetszések számával, és azokkal az atomi lépésekkel, amíg a lépcső megteszi a diszlokáció erdőben a szabad úthossznak megfelelő távolságot. Ezekből adódik [25]:

$$dc = \frac{A_p}{Gb^3} \sigma d\epsilon,$$

ami (1)-gyel megegyezik. Ezt az összefüggést számos mérési eredmény támasztja alá.

4. NEM EGYENSÚLYI VAKANCIA KONCENTRÁCIÓ FENNTARTÁSÁHOZ SZÜKSÉGES MECHANIKAI MUNKA

Ha egy fémbe a vakanciák száma az egyensúlyi felett van, ennek fenntartásához mechanikai munkát kell befektetni [11].

Magas hőmérsékleten a termikus fluktuációk jelentősek, ezért a ponthibák keletkezése a nem konzervatív lépcső mozgással számottevő. A rendszer közel van az egyensúlyi vakancia koncentrációhoz. A keletkezett hibák a lehetséges konfigurációs helyeket betöltik. Az ehhez szükséges munka (η_v) összege vakanciánként éppen a kémiai potenciál:

$$\eta_v = \mu_v = kT \ln (c_v/c_v^0). \quad (2)$$

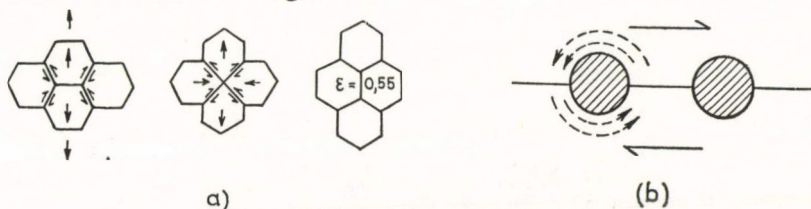
Alacsonyabb hőmérsékleten, ahol a termikus fluktuációk nem játszanak lényeges szerepet, és ha a források és a nyelők között nem áll fenn egyensúly, a szükséges η_v mechanikai munka nagyobb mint az E_v^f képződési energia. A többlet energia attól az atomi mechanizmustól függ, amely a vakanciákat termeli [26]. Ha \dot{W} a teljes időegységenként végzett munka térfogategységenként, akkor

$$\dot{W} > \dot{n}_v \eta_v. \quad (3)$$

Az egyenlőtlenség fennmarad, mert a befektetett energia egy része a diszlokációk mozgásánál disszipálódik.

5. DEFORMÁCIÓ VAKANCIA ÁRAMLÁSSAL POLIKRISTÁLYOKBAN [27]

Polikristályokban állandó terhelésnél jelentős kúszás léphet fel magasabb hőmérsékleten diffúzió által. A folyamat első elemzése *Nabarro* és *Herring* nevéhez fűződik [28]. Lényege az, hogy az alkalmazott külső feszültség hatására a szemcsehatárokon nyújtó és kompressziós feszültségek jelennek meg, ezért a fellépő vakancia kémiai potenciál gradiens vakanciaáramot indít meg. Az ezzel ellentétes irányú anyagáram jelenti a deformációt. Ezért a 7a. ábrának megfelelően az alkalmazott feszültséggel azonos irányú szemcsehatárokból vakanciák diffundálnak, a feszültségre merőleges határokból pedig vakanciák vándorolnak ki. Ily módon a szemcse a feszültség irányába megnyúlik. Az ábrának megfelelő szabályos szerkezet esetén pedig az eredmény a szemcsék egymáshoz képesti elfordulása. *Ashby* [29] a szemcsehatárokon fellépő nyírófeszültségből vezeti le a vakanciaáramot, és az ebből adódó nyírási deformáció sebességet, figyelembe véve a szemcsehatár vastagságot és egy Fourier-sorral leírható periodikus polikristály szerkezetet is. Kiválások esetén a 7b. ábrának megfelelő vakancia-áramlás lehetséges.



7. ábra. a) Polikristály diffúziós deformációja [30],
b) Vakancia-diffúzió kiválás körül [27]

6. PONTTHIBÁK ELEKTROMOS ELLENÁLLÁSA [31]

Az elektromos ellenállást már 10^{-8} atomhányadnyi pontthiba is jól mérhetően befolyásolja. A számított vakanciaellenállások (Cu, Ag, Au esetén [32, 33]):

$$\varrho_v \approx 1,5 \cdot 10^{-6} \Omega \text{ cm (vakancia) atom \%}$$

Összehasonlításként a diszlokációk ellenállása [34]:

$$\varrho_d \approx 10^{-19} \Omega \text{ cm/cm}^3.$$

Pl. 1 %-os deformáció után a pontthiba koncentráció növekmény [32]:

$$C \approx 10^{18} - 10^{19} / \text{cm}^3,$$

míg 10 %-nál:

$$C \approx 10^{19} - 10^{20} / \text{cm}^3.$$

Ezekhez az adatokhoz kb. 10^{-7} , $10^{-9} \Omega \text{ cm}$ ellenállás növekmények tartoznak.

Az ellenállásnövekmény [32, 35, 36] alacsony hőmérsékleteken a folyási feszültség függvényében:

$$\Delta \varrho = A \sigma^2,$$

míg a deformáció függvényében:

$$\Delta \varrho_0 = B \varepsilon^p,$$

ahol $p=2$ Cu egykristályra, míg más fémek esetén $p=1,4-1,8$ közötti érték.

A képlékeny alakítás közben a rácshibák felszaporodnak, ezért az elektromos ellenállás növekszik. Az alacsony hőmérsékleten történő deformáció után egyre magasabb hőmérsékleteken impulzusszerű (1–10 perc) hőkezeléseket alkalmazva az elektromos ellenállást alacsony hőmérsékleten ismét mérjük. Ez az izokron hőkezelés. Ha a hőkezelés alatt a pontthibák mozgása termikusan aktiválódik, akkor a nyelő-kön (szemcsehatárok, diszlokációk, stb.) megszűnnek. Ezért az elektromos ellenállás csökken. Ez lényegében a megújulás folyamata. A következő szakaszokban tárgyalta legjobb eredmény izokron hőkezelés utáni elektromos ellenállásméréssel adódott.

7. A MEGÚJULÁSI SZAKASZOK ÁLTALÁNOS JELLEMZÉSE

A pontthiba keletkezési mechanizmusok és aktiválási energiák kísérleti elemzésére az irodalomban igen elterjedt módszer a fémek alacsony hőmérsékleten történő képlékeny alakítása, majd izokron hőkezelés alkalmazása. A hőkezelés után ismét alacsony hőmérsékleten mérve az elektromos ellenállást, a szórócentrumok számának megváltozása jól mérhető. Öt jellegzetes szakasz figyelhető meg, amelyek mindegyike egy-egy különálló folyamatot jelent, de a tartományokon belüli finomszerkezet további mechanizmusok működésére is utal. Mielőtt részletesen elemeznénk a kísérleti eredményeket, röviden jellemezzük ezeket a szakaszokat.

I. szakasz (0–60 K)

Alakított és besugárzott fémeknél egyaránt megfigyelhető. Besugárzás esetén a fő rész a Frenkel-párok rekombinációjából ered, míg alakítás esetén más folyamatok vannak. A magasabb hőmérsékletű részen lényeges szerepük van az egyedülálló intersticiálisok szabad vándorlásának, de diszlokáció átrendeződés is lehetséges.

II. szakasz (60–220 K)

Kiszabadulnak a szennyezőkből az A típusú intersticiálisok, és lehetségessé válik a hiba-párok szabad mozgása is.

III. szakasz (220—320 K)

Itt már valószínű a B típusú intersticiálisok és a divakanciák vándorlása. Továbbá az A típusú intersticiálisok kiszabadulnak az erősebb kötésekből is.

IV. szakasz (320—450 K)

Egyszerű vakancia vándorlás.

V. szakasz (>450 K)

Itt rekristallizáció megy végbe és jelentős az öndiffúzió hatása.

Megjegyezzük, hogy az egyes megújulási szakaszokra zárójelben megadott hőmérséklet határok egyes anyagokra (az olvadásponttól függően) ezektől eltérőek lehetnek.

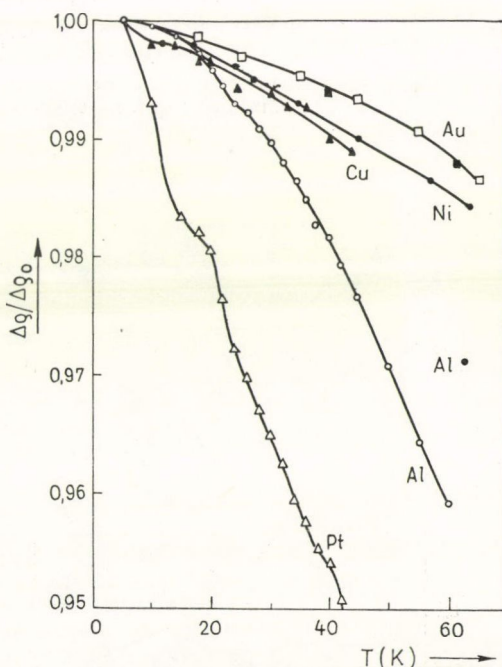
8. A MEGÚJULÁS I. SZAKASZA

A következőkben először a különböző típusú tiszta fémekre vonatkozó eredményeket tekintjük át.

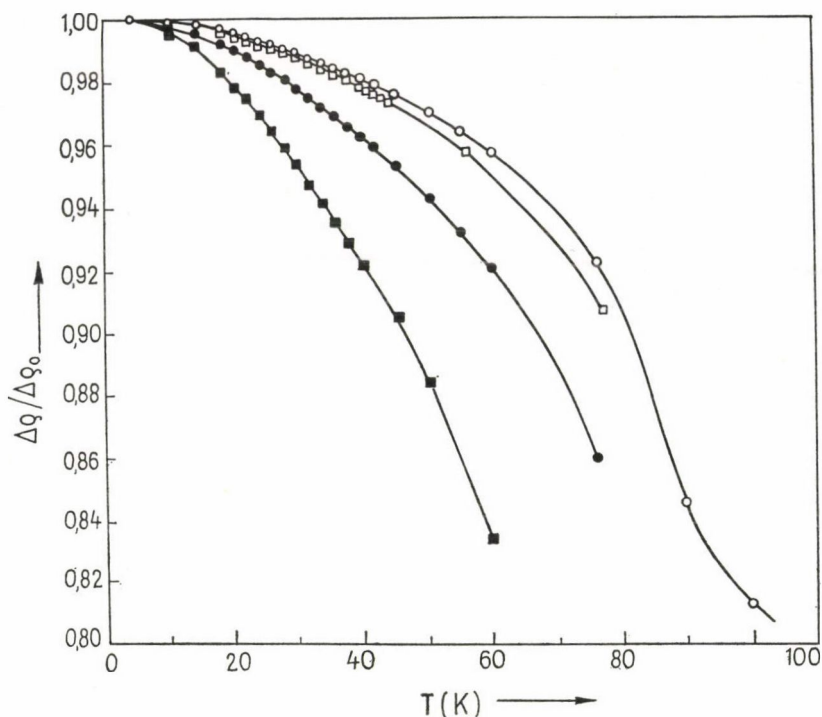
a) Felületcentráltnál köbös fémek

Öt különböző fém esetére (Al, Pt, Au, Cu, Ni) a 8. ábrán láthatjuk a mérési eredményeket [37]. Au, Cu és Ni esetén a megújulás mértéke ($\Delta\varrho/\Delta\varrho_0$) kb. 2%, míg Al és Pt esetén kb. 5%. A megújulás mértéke megnövelhető, ha először alacsony hőmérsékleten deformálunk, utána hőkezelünk 100—300 K közötti hőmérsékleten, majd újabb alakítást hajtunk végre. Al, Pt és Au esetén vannak ilyen mérések. A nagytisztaságú alumíniumra vonatkozó eredményt a 9. ábrán láthatjuk [38].

Vannak fémek, amelyeknél 60 K alatt egymástól jól megkülönböztethető megújulási szakaszok léteznek. Ennek megfelelően pl. Pt esetén az izotermikus hőkezelésekből kapott aktiválási energiák 0,05—0,14 eV ($\pm 0,01$ eV) energia közé esnek. Pl. a 28 K-en jól reprodukálódó szakaszon 0,073 eV, amely jól egyezik azzal az energiával, amit elektron besugárzással lehet kapni. Ezért igen valószínű, hogy ebben a szakaszban A típusú intersticiálisok mozgásának aktiválásáról van szó.



8. ábra. Deformált fcc fémek izotérn megújulásának I. szakasza [37]



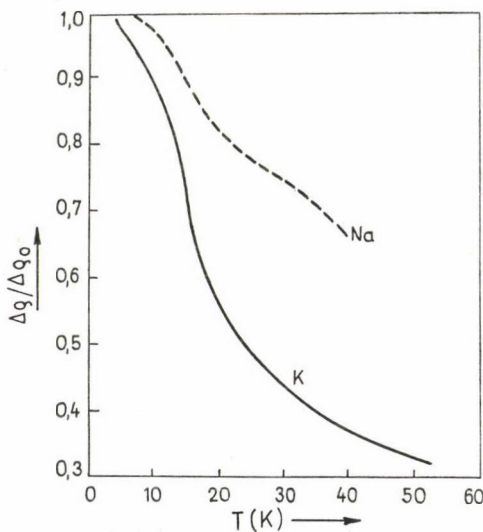
9. ábra. 99,999% tisztaságú deformált Al izokron megújulása [38]

I. minta: ○ I. deformáció $\Delta\rho_0 = 8,804 \times 10^{-9} \Omega\text{cm}$,

● II. deformáció $\Delta\rho_0 = 8,637 \times 10^{-9} \Omega\text{cm}$,

II. minta: □ I. deformáció $\Delta\rho_0 = 19,036 \times 10^{-9} \Omega\text{cm}$,

■ II. deformáció $\Delta\rho_0 = 3,9 \times 10^{-9} \Omega\text{cm}$.



b) Tércentrált köbös fémek

Fe [39], Na és K [40] esetén vannak mérési eredmények (10. ábra). A két alkáli fém nagy tisztaságú, de a vasat nem lehet jól tisztítani. Ezért Fe esetén $\rho_{300\text{K}}/\rho_{4\text{K}} = 400$ volt, ami elég nagy maradékellenállást jelent. Ezeknél a fémeknél igen nagy a megújulás százalékból kifejezve.

10. ábra. 99,999% tisztaságú deformált K és Na izokron megújulása [37, 40]

A Na és K esetén 15 K-nél van egy megújulási szakasz, amelynek kb. 8 K a félszélessége. Ez túl széles ahhoz, hogy kizárólag csak egy folyamat működjön. Ezek a folyamatok vakanciamozgással kapcsolatosak 0,034 ($\pm 0,006$) eV aktiválási energiával.

c) Hexagonális fémek

Cd [37] és Zr [41] esetén körülbelül 25 százalékos megújulás és három jól megkülönböztethető szakasz van.

d) A szennyezők hatása

Kis szennyező koncentráció nem okoz lényeges változásokat. Pt esetén van anómális viselkedés [42], ahol igen nagy a megújulás mértéke (30%) és a megújulási szakaszok majdnem ugrásszerűek. Konstantán esetén pl. egy negatív megújulást észleltek nagyobb szennyező koncentrációnál 60 K alatt [37].

9. A MEGÚJULÁS II. SZAKASZA

Al esetében Swanson végzett méréseket [43]. 60 és 100 K között találta a II. megújulási szakaszt, amely növekedett a deformációval és a befagyasztott vakanciák számával is (11. ábra). Az észlelt aktiválási energiák arra utalnak, hogy kettős intersticiálisok (felhasadt, *B* típus) mozgásáról van szó. Ismételt deformációk esetén főleg intersticiálisok keletkeztek.

Érdekes eredmény, hogy az újabb deformáció megnöveli a megújulás mértékét, de nem változtatja meg lényegesen a fajlagos ellenállásnak a deformációtól függő meredekségét, hanem az ellenállás egy állandóval lesz nagyobb.

A nagy tisztaságú alumíniumon [38], illetve aranyon [44] végzett méréseknél igen érdekes következtetésre jutottak. Az Al esetében a megújulásban 20 K-ig folytonos változás figyelhető meg, és hasonló érvényes Au esetére is. Ezeknél a méréseknél nyilvánvalóvá vált, hogy nem csak ponthibák szerepelnek a megújulásnál, hanem a diszlokációk is átrendeződnek. Ezt a folyamatot mutatja pl. a következő mérés: 4,2 K-en képlékenyen megcsavart minta [45] felmelegítése során a próbatest folyamatos visszacsavarodását észlelték. Ez pedig csak a diszlokáció átrendeződéssel magyarázható. Hasonló eredményre vezettek nikkelen végzett mérések is [46].

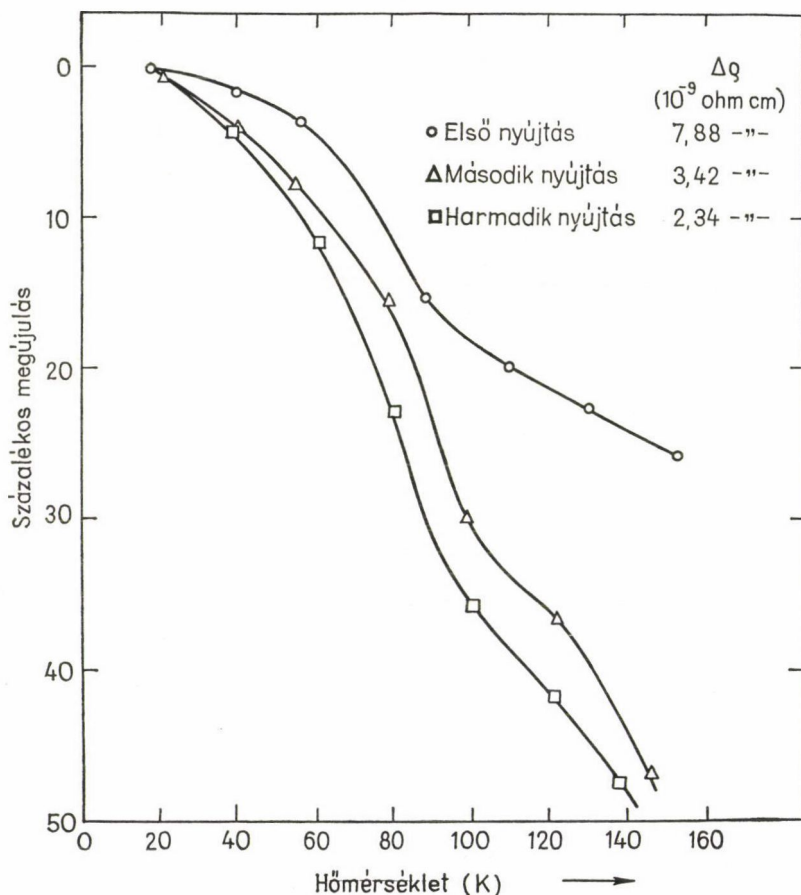
Tércentrált köbös (tck) fémek esetén alacsony hőmérsékleten a folyásfeszültség és a kettős folyáshatár erősen függ a hőmérséklettől, ezért a besugárzás utáni nyújtás a megújulás tanulmányozására jó vizsgálati módszer. Komoly nehézség azonban az, hogy a tck fémek nehezen tisztíthatóak, ezért számba kell venni az intersticiális szennyezők hatását is. Ezek főleg C, N és O lehetnek. Ezért jól definiált módszer az alacsony hőmérsékleten történő elektron vagy neutron besugárzással való ponthiba keltés, amelynek eredménye lényegében független az előélettől. Továbbá előzetes hőkezeléssel a hibaeloszlások megfelelően változtathatók.

Vasban az intersticiális megújulási szakasz 100 K körül van [47]. 77 K-en történő besugárzással és nyújtással részletes folyásfeszültség vizsgálatot végeztek Groh és

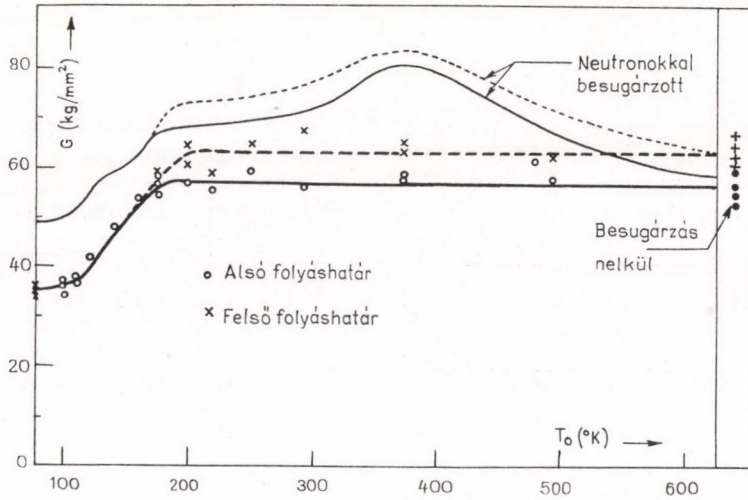
munkatársai [2]. A mérések eredménye a 12. ábrán látható. Elektron besugárzás esetén egy megújulási szakaszt észleltek a 130—180 K közötti hőkezelési tartományban, míg neutron besugárzásnál kettőt a 130—180 és a 250—350 K hőmérséklet tartományban.

Tck fémeknél a folyásfeszültség általában egy hőmérséklettől függő és egy független komponensre bontható. A ponthiba csoportok rögzítik a kezdeti diszlokációkat, amelyeket csak a felső folyáshatárhoz tartozó feszültség tud mozgásba hozni. Amikor kiszabadulnak, elkezdődik a sokszorozódásuk és a továbbiakban a csoportok határozzák meg az alsó folyáshatár hőmérséklettől független komponensét.

Az izolált ponthibák és mozgó éldiszlokációk közötti reakció a 13. ábrán szemléltetjük. A kezdetben rögzült éldiszlokáció körül intersticiális felhő helyezkedik el, mert a diszlokáció nagyobb hatótávolsággal vonzza az intersticiálisokat, mint a vakanciákat. Ha a csúsztató feszültség elegendően nagy, az éldiszlokáció elmozdul, miközben a súrolt felület környezetéből a ponthibákat nem konzervatív lépcső moz-



11. ábra. Az előzetes deformáció hatása 99,999% tisztaságú deformált Al izokron megújulására [43]



12. ábra. A folyásfeszültség függése az izokron hőkezeléstől 77 K-en elektron besugárzott Fe esetén [2]

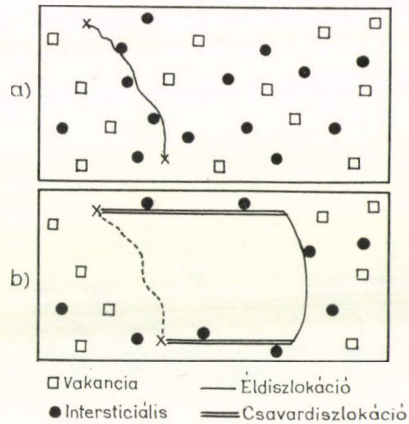
gással elnyeli. Ezért a folyásfeszültség kisebb mint besugárzás nélkül. Az alakítási keményedés első szakaszát ez a folyamat határozza meg. Ha az éldiszlokáció két vége rögzített, két csavar-jellegű szakaszt húz maga után, amelyek mentén intersticiálisok helyezkednek el a 13b ábrának megfelelően [2].

10. A MEGÚJULÁS III. ÉS IV. SZAKASZA

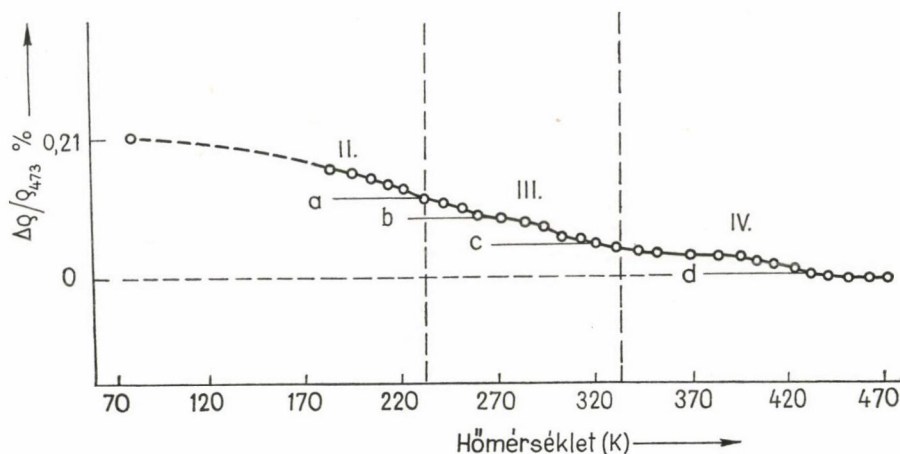
Dawson [48] Cu esetén azt találta, hogy $\varepsilon = 0,03$ -nál négy jól megkülönböztethető megújulási szakasz van (14. ábra). A III. és IV. szakaszhoz tartozó aktiválási energia 0,4–0,8 eV, amit divakanciák, illetve vakanciák mozgásának aktiválásával azonosított.

Seeger [49] szerint azonban Cu esetén a vakanciák mozgási aktiválási energiája határozottan nagyobb 1 eV-nál (a legvalószínűbb érték 1,06 eV), ezért az említett szakaszokban ezek aktiválása nem valószínű. Divakanciák mozgási aktiválása és Polák eredményeinek megfelelően [50] intersticiális és vakancia kölcsönös annihilációja történhet a III. szakaszban.

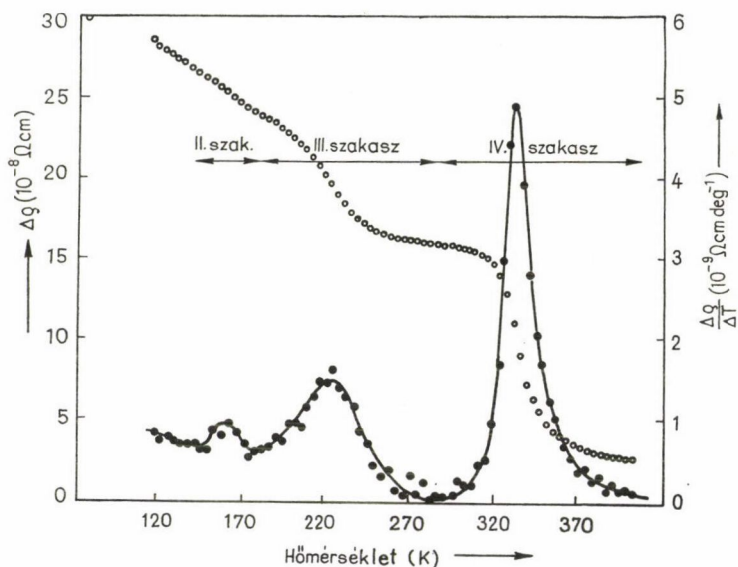
Polák egyidejű csavarás és nyújtással $\gamma = 6,6$ nyírásig deformált Cu mintákat vizsgált. Az izokron hőkezelési görbéket a 15. ábrán láthatjuk. Érdekes, hogy az ábrán a IV. szakasz helyén tulajdonképpen az V. rekristallizációs szakasz található, amelynek oka az, hogy erős deformáció esetén ez a szakasz a kisebb hőmérsékletek



13. ábra. Diszlokáció mozgás-modellje besugárzott vasban [2]



14. ábra. Cu izokron megújulása a deformáció függvényében [48]



15. ábra. Csavarással deformált Cu izokron hőkezelési görbéje [50]

felé tolódik el. Az izotermikus hőkezelésekből kapott $1/\Delta\rho_{\text{III}}$ adatok $t^{1/2}$ függvényében lineáris összefüggést adnak, amely másodrendű kinetikára utal. Erre az eredményre *Waite* [51] elméleti megoldása alapján következtethetünk, amely szerint fémekben a vakanciák és intersticiálisok kölcsönös annihilációja a koncentrációk szorzatával arányos:

$$\frac{dc_v}{dt} = \frac{dc_i}{dt} = -\frac{16\pi r_0 D}{a^3} \left[1 + \frac{r_0}{(\pi Dt)^{1/2}} \right] c_i c_v,$$

ahol c_i , c_v az intersticiálisok és vakanciák relatív koncentrációi, r_0 a kölcsönhatás távolsága, a a rácsparaméter és D a kétféle hibatípus diffúziós tényezőinek összege. Ez az egyenlet könnyen integrálható, ha $c_i = c_v = c$, ekkor:

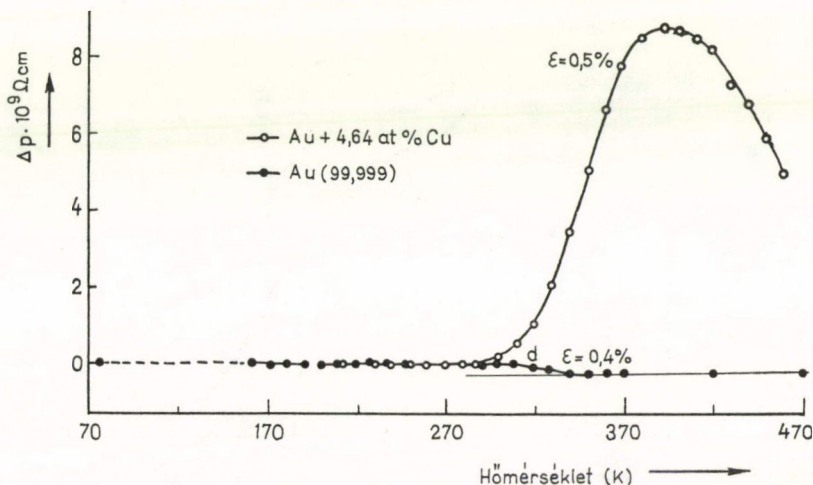
$$\frac{1}{c} = \frac{1}{c_0} + \frac{16\pi r_0 D}{a^3} \left[t + \frac{2r_0}{(\pi D)^{1/2}} t^{1/2} \right].$$

Ebben az összefüggésben az elsőrendű tag elhanyagolható, ha c_0 és r_0 nagy. A nagy deformáció miatt c_0 biztosan elegendően nagy érték, és az elsőrendű tag elhanyagolásával kapható $r_0 \approx 5$ a szintén. A hőkezelési kinetikára kapott elméleti eredmény jól egyezik a mérésekből kapottal, amely azt jelenti, hogy erősen deformált Cu esetén a III. szakaszban $c_i = c_v$ és a kölcsönös annihilációt leíró másodrendű kinetika a kísérleti eredményekkel összhangban van. Az annihilációhoz szükséges intersticiális ugrások számára 91 adódott, amely nagyságrendekkel kisebb régebbi (kevésbé deformált anyagra) vonatkozó eredményeknél. Az intersticiálisok valószínűleg dumbbell konfigurációban (ld. 1B ábra) mozogva annihilálódnak a vakanciákon. Természetesen nem zárható ki divakanciák és diintersticiálisok mozgásának aktiválása sem, amelyek még mozgékonyabbak.

Érdekes a tiszta Au és ötvözetének (Au + 4,64 at % Cu) megújulása [48] (16. ábra). Ha az abszolút ellenállásváltozás függvényében ábrázolunk, az izokron megújulás 293 K-ig nem észlelhető. Ezután a tiszta anyag 343 K-ig mutat egy megújulási szakaszt, az ötvözet pedig *növeli* ellenállását. Itt nyilván arról van szó, hogy az eddig kötött állapotban levő vakanciák folyamatosan kiszabadulnak a csapdákból, és ez növeli az ellenállást.

A megújulás III. szakaszának kinetikájára kétféle elképzelés ismeretes. Az egyik az ún. *Harper* formula, amely szerint

$$c = c_0 \exp(-Kt^m).$$



16. ábra. Az Au és Au(Cu) izokron megújulásának összehasonlítása nagyon kis deformációk esetére [48]

m értéke függ a deformációtól, általában $1/2$ körüli érték. *Ikeuchi* és munkatársai mérései szerint [52]:

$$m = 0,5 + a \exp(-b\Delta\varrho_d),$$

ahol a és b konstansok és $\Delta\varrho_d$ a diszlokációsűrűség változás adott plasztikus deformáció hatására.

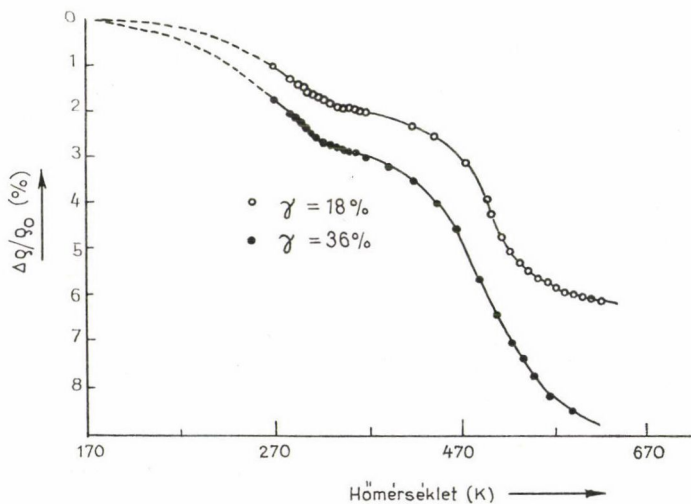
Al és Fe hidegalakítása után végzett vizsgálatok alapján a III. szakaszban a *Harper* formula elegendően pontos. *Winterberger* szerint [53] ez a formula a vakanciák diszlokációkhoz történő diffúzióját írja le az idő függvényében.

Egy másik elképzelés szerint [54] a III. szakasz oka az, hogy az intersticiálisok a rögzült vakanciákhoz vándorolnak másodrendű kinetika szerint. *Van den Beukel* kimutatta [55], hogy az utóbbi elképzelésre felállított formula kielégítően egyezik a Harper kifejezés sorfejtésének alakjával a második tagig. Ennek ellenére inkább az [54] másodrendű kinetika az elfogadhatóbb, mert emögött elfogadható fizikai tartalom is van.

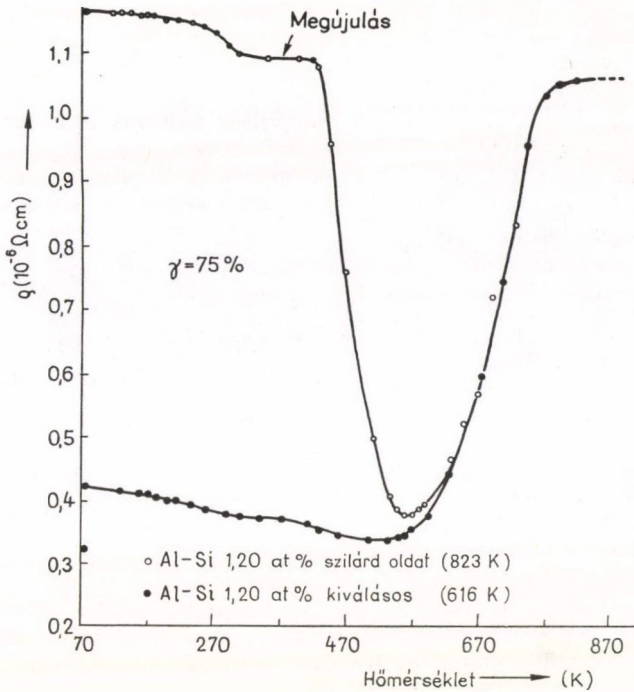
Nagy tisztaságú Pt esetén végzett mérések [56] (17. ábra) szerint a megújulás IV. szakasza 273 és 293 K között szintén másodrendű kinetikával írható le 0,6 eV aktiválási energiával. Ennek alapján a folyamat intersticiális atomok és mozgásképtelen vakanciák rekombinációja. Az ábrán látható további szakasz 1,4 eV aktiválási energiájú. Részleteiben még nem tisztázott, hogy milyen folyamatról van szó.

Ötvözetek esetén a megújulás jelentősen függ az ötvözet állapotától. Pl. Al—Si ötvözet esetén szilárd oldat állapotban, ill. precipitált állapotban a megújulás jelentősen különbözik (18. ábra) [57]. A III. szakaszra kapott eredményeket úgy lehetett értelmezni, hogy vakancia-szennyező párok alakultak ki, amelyek aktiválási energiája 0,22 eV.

Wolfram [58] és molibdén [59] hidegalakítása utáni megújulás III. szakasza a 650 ill. 500 K hőmérsékletek körül található. A W esetében ebben a szakaszban az



17. ábra. 78 K-en hidegen alakított Pt izokronon megújulása [56]



18. ábra. 78 K-en hidegen alakított Al—Si izokron megújulása [57]

aktiválási energia 1,65-től 1,75 eV-ig növekedést mutat, és hasonló tendencia érvényes Mo esetére is. Az aktiválási energia ilyen növekedése különböző méretű kicsiny ponthiba csoportok aktiválásával értelmezhető [58].

Az V. szakaszban lejátsszóó folyamatok az újrakristályosodással kapcsolatosak, amelyekkel a további dolgozatok foglalkoznak.

11. ÖSSZEFOGLALÁS

Jelen dolgozatban áttekintettük a plasztikus deformáció esetére jelenleg ismeretes ponthiba keletkezési elméleteket és elemeztük az eltűnési folyamatokat. Részletesen vizsgáltuk a megújulási szakaszokat és az eredmények alapján megállapíthatjuk, hogy az ezekben működő folyamatok természete többé-kevésbé jól tisztázható. Az egyes szakaszokon belüli finomszerkezet értelmezése azonban az eddigi eredmények alapján még nem végezhető el.

IRODALOM

1. I. Kovács and H. El Sayed, *Journal of Materials Science*, 11, 545, 1976.
2. P. Groh, F. Vanoni and P. Moser, *Nuclear Metallurgy*, 18, 19, 1973.
3. F. W. Wiffen, *ibid* 18, 176, 1973.
4. J. Moteff, D. J. Michel and V. K. Sikka, *ibid* 18, 198, 1973.
5. R. O. Simmons, J. S. Koehler and R. W. Baluffi, *Radiation Damage in Solids*, Vol. 1. IAEA, Vienna 1962. p. 155.

6. M. L. Swanson, *Phys. stat. sol. (a)* 3, 279, 1970.
7. A. Seeger, *Radiation Damage in Solids*, Vol. 1. IAEA, Vienna 1962.
8. J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram and G. H. Vineyard, *Phys. Rev.* 120, 1229, 1960.
9. R. H. Silsbee, *J. Appl. Phys.* 28, 1246, 1957.
10. C. J. Meechan, A. Sosin and J. A. Brinkman, *Phys. Rev.* 120, 411, 1960.
11. R. W. Balluffi, A. L. Ruoff, *J. Appl. Phys.* 34, 1634, 1848, 2862, 1963.
12. F. Seitz, *Adv. Phys.* 1, 43, 1952.
13. P. B. Price, *Phil. Mag.* 5, 873, 1960.
14. P. B. Hirsch, *Phil. Mag.* 7, 67, 1962.
15. N. F. Mott, *Trans. AIME.*, 218, 962, 1960.
16. L. Zsoldos, *Phys. Stat. Sol.* 3, 2127, 1963.
17. J. Weertman, *ibid* 8, 967, 1963.
18. J. Friedel, *Dislocations*, Pergamon Press, Oxford, 1964. p. 273.
19. G. Saada, *Acta Met.* 9, 166, 1965, 1961.
20. P. B. Hirsch, *Internal Stresses and Fatigue in Metals*, (ed. G. M. Rossweiler and W. L. Grube) Elsevier, Amsterdam, 1959. p. 139.
21. N. F. Mott, *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*, eds. J. C. Fisher, et al., Wiley, New York, 1957. p. 458.
22. P. Feltham, *Phys. Stat. Sol.* 6, 235, 1964.
23. I. Kovács, E. Nagy and P. Feltham, *Phil. Mag.* 9, 797, 1964.
24. S. Yoshida, T. Kino, M. Kiritani, S. Kabemoto, H. Macta and Y. Shimomura, *J. Phys. Soc. Jap.* 18, Suppl. II, 98, 1963.
25. I. Kovács, *Acta Met.* 15, 1731, 1967.
26. S. Pearson, A. J. Board and C. Wheeler, *Phil. Mag.* 6, 979, 1961.
27. B. Burton, *Vacancies '76*, Proceedings of a Conference by The Metals Society, Bristol, 1976. p. 156.
28. W. A. Wood: *The Study of Metal Structures and Their Mechanical Properties*, London, Pergamon Press, 1971. p. 336.
29. M. F. Ashby et al. *Scripta Met.* 4, 737, 1970.
30. M. F. Ashby and R. A. Verral, *Acta Met.* 21, 148, 1973.
31. M. L. Swanson, *Phys. Stat. Sol. (a)* 3, 287, 1970.
32. H. G. Van Bueren, *Imperfections in Crystals*, North-Holland, Amsterdam, 1960.
33. A. C. Damask and G. J. Dienes, *Point Defects in Metals*, Gordon and Breach, New York, 1963.
34. Z. S. Basinski, J. S. Dugdale and A. Howie, *Phil. Mag.* 8, 1989 (1963).
35. M. L. Swanson, *Can. J. Phys.* 42, 1890, 1964.
36. M. L. Swanson and A. F. Quenneville, *Phys. Stat. Sol.* 32, 357, 1969.
37. M. L. Swanson, *Phys. Stat. Sol. (a)* 3, 551, 1970.
38. M. L. Swanson and A. F. Quenneville, *Appl. Phys. Letters*, 10, 179, 1967.
39. M. Kaneko, N. Okumura and T. Sugeno, *Scripta Met.* 3, 849, 1969.
40. D. Guban, *Phil. Mag.* 13, 533, 1966.
41. M. L. Swanson, *Can. J. Phys.* 44, 3241, 1966.
42. M. L. Swanson, *Scripta Met.* 3, 635, 1969.
43. M. L. Swanson, *Can. J. Physics*, 42, 1890, 1964.
44. S. Okuda and S. Takamura, *Phys. Letters*, 25 A, 3, 1967.
45. S. Okuda, *J. Appl. Phys.* 34, 3107, 1963; *Sci. Papers, I. P. C. R.* 57, 116, 1963.
46. D. Reits, R. W. Starrevel and H. J. De Wit, *Phys. Letters*, 16, 13, 1965.
47. A. Sato, Thesis, Northwestern University, Evanston, Illinois, 1972.
48. H. I. Dawson, *Acta Met.* 13, 453, 1965.
49. H. Mehrer and A. Seeger, *phys. stat. sol.* 35, 313, 1969.
50. J. Polák, *Phys. stat. sol.* 40, 677, 1970.
51. T. R. Waite, *Phys. Rev.* 107, 463, 1957.
52. K. Ikeuchi, K. Furukawa and J. Takamura, *J. Nucl. Mat.* 69—70, 676, 1978.
53. M. Winterberger, *Acta Met.* 7, 549, 1953.
54. F. Ramsteiner, W. Schüle and A. Seeger, *Phys. stat. sol.* 7, 937, 1964.
55. A. van den Beukel, *Scripta Met.* 2, 327, 1968.
56. I. Kovács and B. Sas, *Phil. Mag.* 34, 937, 1976.
57. A. Hegazi, I. Kovács and E. Nagy, *Phys. stat. sol.* 33, 131, 1969.
58. J. Cornelis, L. Stals, P. De Meester, J. Roggen and J. Nihoul, *J. Nucl. Mag.* 69—70, 704, 1978.
59. J. Cornelis, P. De Meester, L. Stals and J. Nihoul, *Phys. stat. sol. (a)*, 18, 515, 1973.

5. DEFORMÁCIÓS TÁROLT ENERGIA

LENDVAI JÁNOS
ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	435
2. A tárolt energia mérése	436
2.1. Egylépcsős módszerek	437
2.2. Kétlépcsős módszerek	438
2.3. A mérési módszerek összehasonlítása	440
3. A tárolt energia mennyiségét és felszabadulását befolyásoló tényezők	442
4. A tárolt energia mérések értelmezése	442
5. Összefoglalás	444
6. Irodalom	444

1. BEVEZETÉS

A fémek hideg alakítása során végzett mechanikai munka nagyobb része hővé alakul, a maradék a fém belső energiáját növeli, ez utóbbit nevezzük tárolt energiának. Az energia tárolásának módja jellemzi az alakítási folyamatot, a tárolt energia pedig az alakított állapotot. Az alakított fémekben megfelelő hőmérsékleteken megújulási, illetve újrakristályosodási folyamatok mennek végbe, melyek során a tárolt energia felszabadul. A tárolt energia ismerete tehát lényeges a hideg alakítás, a deformált állapot, valamint a megújulási és újrakristályosodási folyamatok szempontjából.

Mivel a tárolt energia a fém belső energiájának a képlékeny alakításból származó megváltozása, ezért az alakváltozást létrehozó erőhatás megszűnéskor a tárolt energia nem szabadul fel mindaddig, amíg megújulási, illetve újrakristályosodási folyamatok nem lépnek fel. Ez különbözteti meg a tárolt energiát a makroszkopikus rugalmas deformációs energiától.

Az alakítási folyamattal kapcsolatos energiaviszonyokat a termodinamika első főtétele alapján vizsgálhatjuk:

$$\Delta E = Q + W, \quad (1)$$

ahol ΔE a test belső energiájának megváltozása, Q az alakítás során felvett vagy leadott hőmennyiség, W a folyamatban végzett munka. Az (1) egyenlet szerint Q pozitív, ha a test hőt vesz fel és W pozitív, ha a testen végzünk munkát. Az (1) összefüggés természetesen nem jelent semmiféle megszorítást a deformáció körülményeire nézve, tehát nem kell, hogy például izotermikusan, vagy adiabatikusan történjen az alakítás, sőt nem követelmény a reverzibilitás sem.

Egy szokásos hideg alakítási folyamatban, melyben hőátadással nem közlünk

energiát a testtel, a deformáció közben és közvetlenül utána a test $|Q|$ hő leadásával jut vissza kiindulási hőmérsékletére. Ilyenkor ΔE megegyezik az E_s tárolt energiával:

$$E_s = \Delta E = Q + W. \quad (2)$$

A Q és W mennyiségek között fennállnak továbbá a következő relációk:

$$Q < 0 < W; \quad |Q| < |W|. \quad (3)$$

Az alakítási folyamat során végzett mechanikai munka általában numerikus, vagy grafikus integrálással meghatározható a közvetlenül mérhető erő-elmozdulás diagramok alapján. Az ipari folyamatokban (pl. dróthúzás, hengerlés, sajtolás stb.) előforduló összetett alakváltozások esetén már lényegesen nehezebb megadni a deformációs munkát és további problémát jelent, hogy ezen folyamatokban az alakítás menete nem azonos az anyag valamennyi elemi térfogatára. Általában az ilyen összetett alakítási folyamatok során befektetett munka nagyobb, mintha azonos mértékű alakváltozást egyszerű deformációval (pl. tiszta nyújtással, vagy összenyomással) hozunk létre. A többletmunka egy része növeli az anyagban tárolt energiát, a másik része pedig a fellépő súrlódás leküzdésére fordítódik. A súrlódási munka természetesen nem növeli a tárolt energiát, sőt az anyag a súrlódás következtében felmelegedhet olyan hőmérsékletekre, amelyeken már megújulás vagy újrakristályosodás is lehetséges, ami a tárolt energiát csökkenti.

A (2) összefüggés alapján nyilvánvaló, hogy a tárolt energia nemcsak az alakítás mértékétől, hanem annak menetétől, a folyamat útjától is függ. Az irodalomban legtöbbször ennek ellenére a legnagyobb normális vagy nyíró deformáció függvényeként közlik a tárolt energiát. Ezek a deformációk alkalmasak egy adott típusú alakítás jellemzésére, nem alkalmasak azonban további megfontolások nélkül különböző alakítási folyamatok összehasonlítására.

Gyakran használják a tárolt energia méréseknél a befektetett munkát (W) a deformációs állapot jellemzésére. Ez a mennyiség azonban — éppúgy mint a maradék alakváltozás — nem állapotjelző, ezért az $E_s(W)$ függvény is csak adott típusú deformációk esetén egyértelmű. A különböző alakítási folyamatok során meghatározott $E_s(W)$ függvények közötti eltérésekből az energiatárolás mechanizmusának különbségeire következtethetünk.

A következőkben áttekintjük a deformációs tárolt energia mérések elvét és módszereit, majd röviden megvizsgáljuk az energiatárolást és a tárolt energia felszabadulását befolyásoló leglényegesebb tényezőket, végül kitérünk a tárolt energia értelmezésére és a tárolt energia mérésekből levonható következtetésekre.

2. A TÁROLT ENERGIA MÉRÉSE

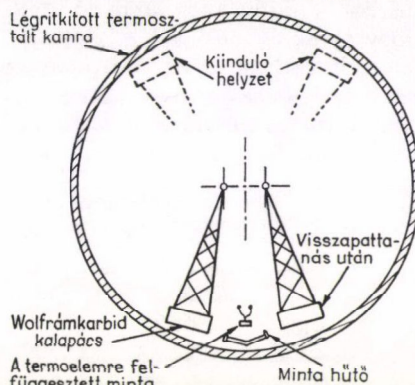
A deformációs tárolt energia meghatározására alkalmazható mérési eljárások két csoportba sorolhatók [1, 2]. Az egylépcsős módszerek a termodinamika első fő-tételének közvetlen alkalmazásával határozzák meg a tárolt energiát, a Q és W mennyiségek mérése a deformáció közben történik. A kétlépcsős eljárásoknál a tárolt energiát a deformáció létrehozása után kaloriméteres méréssel határozzák meg. A deformációs tárolt energia viszonylag kicsi, tipikusan legalább 3 nagyságrenddel kisebb, mint az olvadáshő. Így nyilvánvaló, hogy a tárolt energia meghatározása igen nehéz kísérleti feladat és érthető, hogy a mért tárolt energia adatok között lát-szólag ok nélkül is igen nagy eltérések adódhatnak.

2.1. Egylépcsős módszerek

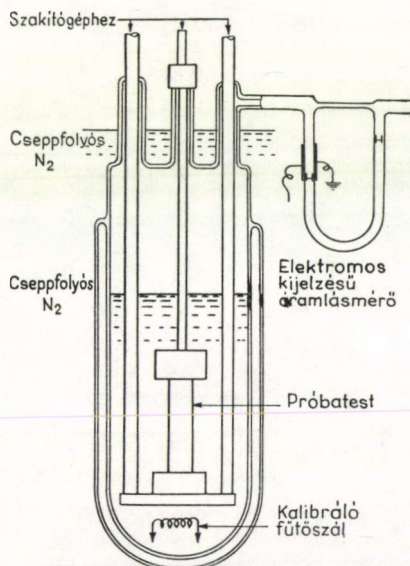
Az egylépcsős módszerek a tárolt energiát közvetlenül a (2) egyenlet alapján határozzák meg, az alakítás közben egyidejűleg mért deformációs munka és hő különbségeként. Az első tárolt energia mérések az 1900-as évek elején egylépcsős módszerrel történtek [3–5] és az eljárást azóta is számos vizsgálatnál alkalmazták. A konkrét mérési elrendezések részletesebb ismertetése az összefoglaló munkákban megtalálható [1, 2]. Mi itt csak két, viszonylag újabb típusú berendezést mutatunk be a módszer illusztrálására.

Az 1. ábrán látható ejtőkalapácsos kalorimétert Williams dolgozta ki [6–9]. A mintát két szabadoncsúszó wolfrámkarbid kalapács deformálta, a minta és a kalapácsok érintkezési ideje 0,002 s-nál rövidebb volt, így a minta és a kalapácsok közötti hőcsere elhanyagolhatóan kicsi. A minta hőmérsékletének változását termoelem mérte, amit egyben a minta felfüggesztésére is felhasználtak. A mérés vákuumban történt, hogy a környezettel való hőcserét megakadályozzák, így a Q hőmennyiség a minta és a termoelem hőkapacitásának ismeretében a deformációt követően mért hőmérséklet emelkedésből meghatározható. A berendezésen ablakok biztosították, hogy a minta méretváltozása, valamint a kalapácsok kiindulási és visszapattanási helyzete pontosan mérhető legyen. A mintát minden újabb deformáció előtt a kiindulási hőmérsékletre hűtötték. Williams szerint az ejtőkalapácsos kaloriméterrel a tárolt energia $\pm 10\%$ pontossággal határozható meg.

Az egylépcsős tárolt energia mérési módszerek másik gyakran használt típusánál a minta egy szobahőmérsékletnél alacsonyabb forráspontú folyadékkal érintkezik és a hőmennyiséget a deformáció következtében elpárologtatott gőz mennyiségének mérésével határozzák meg [10–12]. A 2. ábrán látható Wolfenden—Appleton-féle kaloriméterben a minta folyékony nitrogénbe merült. A mintát szakaszosan deformálják, a leadott hő következtében megnő a gázfejlődés, a gáz mennyiségét áramlásmérővel mérik és regisztrálják. Minden alakítási lépést kalibráció követ, melynek során elektromos fűtéssel párologtatják el a folyadékot. A folyadék-gőz de-



1. ábra. A Williams-féle ejtőkalapácsos kaloriméter



2. ábra. A Wolfenden—Appleton-féle deformációs kaloriméter

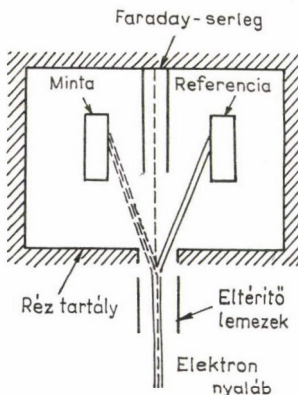
formációs kalorimétereket általában -196°C és szobahőmérséklet között használják tárolt energia mérésre. Wolfenden és Appleton a mérés hibáját $\pm 30\%$ -ra, Williams egy hasonló elven működő mérőberendezésnél $\pm 5\%$ -ra becsüli.

2.2. Kétlépcsős módszerek

A kétlépcsős módszerek alkalmazásakor a tárolt energiát nem a deformáció alatt, vagy közvetlenül utána, hanem a deformáció befejezése után hosszabb idővel mérik. A tárolt energia ilyen módszerrel történő meghatározásához az szükséges, hogy a mérés megkezdése előtt megújulási vagy újrakristályosodási folyamatok ne játszódhassanak le. A kétlépcsős eljárások legelterjedtebben alkalmazott csoportjánál a megújulási és újrakristályosodási folyamatok során felszabaduló energiát mérik. A mérés történhet anizotermikus vagy izotermikus kaloriméterrel. Az anizoterm méréseknél a minta hőmérsékletét folyamatosan növelik, általában állandó fűtési sebességgel és az energia felszabadulást a hőmérséklet függvényében regisztrálják. Az izoterm méréseknél a mintát állandó hőmérsékletű kaloriméterbe helyezik és a felszabaduló energiát az idő függvényében mérik.

Az anizoterm méréseknél leggyakrabban a szokásos differenciális technikák (DTA, DSC) valamelyikét alkalmazzák [1, 2], de ismeretes néhány nem differenciális módon végzett anizoterm mérés is [pl. 13–15]. A legáltalánosabban használt kaloriméteres módszerekről az irodalomban számos kitűnő összefoglaló található [pl. 1, 2, 16, 17], ezért mi itt csak két, az utóbbi időben kifejlesztett tárolt energia mérésre használt dinamikus kalorimétert ismertetünk röviden.

Az első egy nem differenciális üzemmódban működő kaloriméter [18], ahol a minta egy 10^{-6} hgmm nyomású térben helyezkedik el. A kaloriméter tartály falait állandó hőmérsékleten (0°C) tartják, a minta egy 13 mm átmérőjű, 30 mm hosszú, 1 mm falvastagságú cső. A mintát a belsejében elhelyezkedő elektromos fűtőszál állandó teljesítménnyel fűti, kb. 1°C/s sebességgel. A minta hőmérsékletét egy termoelem méri, az adatokat 0,4 másodpercenként regisztrálták. A tárolt energia felszabadulást a minta első és második felfűtése során mért hőmérséklet-idő függvények különbségéből határozták meg. A berendezés 300 és 600 K között működik, az érzékenységet $0,05\text{ J/g}$ -ra becsülik.



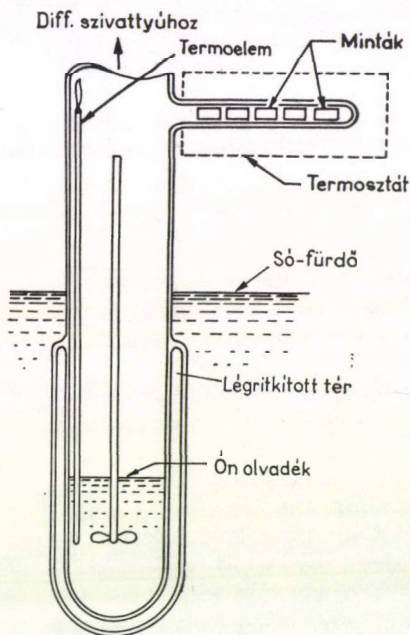
3. ábra. A Steffen—Wollenberger-féle elektronsugár-fűtésű differenciális kaloriméter

A másik egy elektronnaláb-fűtésű adiabatikus differenciális kaloriméter [19–20]. A berendezés elvi vázlata a 3. ábrán látható. A deformált minta és a jól kilágyított referencia minta egy hengeres réztartályban helyezkedik el. A réztartályt nagy pontossággal állandó, $1,3$ fok/perces fűtési sebességgel melegítik. A mintákat 5 KeV -os elektronokból álló elektronnalábbal bombázzák, ez fűti a mintákat. Az elektronnalábot egy elektrosztatikus eltérítő rendszer úgy mozgatja, hogy az 100 Hz frekvenciával felváltva esik a mintára és a referencia mintára. Az elektronnaláb intenzitását úgy szabályozzák, hogy a minták hőmérséklete állandóan megegyezzen a réztartályéval. A tárolt energia felszabadulásakor a minta fűtéséhez a refe-

rencia mintához viszonyítva kisebb teljesítmény szükséges. Ezt úgy biztosítják, hogy lerövidítik az elektronnyaláb beesési idejét a mintán. A megfelelő félperiódusból fennmaradó idő alatt a nyaláb eltérítés nélkül, egyenesen halad és a réztartályra erősített Faraday-serleg fogja fel az elektronokat. Ha a beesési időt úgy szabályozzák, hogy a minta és referencia minta melegedési sebessége mindig megegyezik, akkor a beesési idők aránya közvetlenül a minta és referencia minta hőkapacitásának arányát adja. A hőkapacitások különbségének ismeretében a tárolt energia meghatározható. A kaloriméter 310 és 700 K közötti hőmérsékleteken működik. A méréseknél használt minták viszonylag nagyméretűek, 10 mm átmérőjű, 25 mm magas hengerek. A tárolt energia mérés hibája 3 és 10 % között változik.

Az izoterm kaloriméteres mérések elvileg hasonló berendezésekkel történhetnek, mint az anizotermek. Az állandó hőmérsékleten végzett vizsgálatok előnye a változó hőmérsékletűekkel szemben az, hogy az energia felszabadulás kinetikája közvetlenül vizsgálható. A módszer hátránya — mint minden in situ izoterm vizsgálatnak —, hogy a mérés elején elkerülhetetlenül szükség van egy várakozási időre, amely alatt a minta hőmérséklete stabilizálódik és ezen idő alatt a folyamatnak egy nem elhanyagolható része végbe mehet. Ez a várakozási idő a tárolt energia mérések esetén 15 perc és 1 óra között változik [2, 21–25] és az ezalatt felszabadult energia csak a mért teljesítmény—idő függvény visszafelé történő extrapolálásával határozható meg, elég nagy bizonytalansággal.

A kétlépcsős módszerek egy másik csoportjánál, az ún. reakció módszernél nem a megújulás vagy újrakristályosodás alatt felszabaduló hőt, hanem valamilyen reakcióhő megváltozását mérik. A módszert az utóbbi időben főleg *Bever és munkatársai* alkalmazták tárolt energia meghatározására [1, 26, 27], akik azt használták ki, hogy szilárd fémek folyékony fémbe történő feloldásakor az oldáshő nagyon kicsi lehet. Lényeges követelmény továbbá, hogy az oldási folyamat gyors legyen. A tárolt energia méréseknél oldószerként ön olvadékokat használtak. A berendezés elvi vázlata a 4. ábrán látható. A méréseknél az olvadékba felváltva ejtenek deformált és nem deformált mintákat, az oldódáshőt a fürdő hőmérsékletváltozásából határozzák meg. A mérés hibája kb. ± 8 J/mol, ezért ez a módszer olyankor alkalmazható, ha a tárolt energia elég nagy, tehát ötvözeteknél, viszonylag nagy deformációk után.



4. ábra. A reakció módszernél alkalmazott kaloriméter elvi vázlata

2.3. A mérési módszerek összehasonlítása

Mivel a tárolt energia kicsi, meghatározásához igen érzékeny, jól reprodukáló mérőberendezésekre van szükség. Az egylépcsős módszerek előnye, hogy mivel a mérés a deformáció közben és közvetlenül utána történik, biztos, hogy nem szabadul fel tárolt energia a mérés megkezdése előtt, aminek veszélye a kétlépcsős módszerek-nél mindig fennáll. Az egylépcsős módszerek bizonytalansága azonban nagy. Ennek oka az, hogy a tárolt energia az alakítási munkának általában mindössze néhány százaléka. A tárolt energiát az egylépcsős módszereknél a befektetett munka és a felszabaduló hő mérésének alapján határozzák meg és mindkét mért mennyiség kb. húszszorosa a tárolt energiának. Következésképpen a mérendő mennyiségeket 0,5 %-nál pontosabban kell meghatározni, hogy a különbségükből adódó tárolt energia hibája ne haladja meg a 20 %-ot. A deformáció közben fejlődő hő 0,5 %-nál pontosabb meghatározása rendkívül nehéz. A termikus kontaktus a minta és a szakítógép befogói között megnehezíti a minta és a környezet közötti hőcsere pontos meghatározását. Ez a nehézség elvben elkerülhető, pl. az ejtőkalapácsos kaloriméter alkalmazásával és igen gyors hőmérsékletméréssel. Az alkalmazott hőmérsékletmérő eszköznek 10^{-4} érzékenységűnek kell lennie 1 s-nál rövidebb időállandó mellett.

A kétlépcsős módszerek alkalmazhatóságának egyetlen lényeges korlátja van az egylépcsős módszerekhez képest: nem szabad, hogy a tárolt energia felszabadulásával párhuzamosan a mintában valamilyen más folyamat (pl. kiválás, oldódás, rendeződés, stb.) is végbemenjen. Ezen folyamatok reakcióhője ugyanis több nagyságrenddel nagyobb, mint a tárolt energia és így ilyenkor a tárolt energia a reakcióhő mérés hibájával azonos nagyságú, vagy kisebb. Ez a korlátozás igen lényeges, mivel gyakorlatilag azt jelenti, hogy pl. a mechanikai tulajdonságok szempontjából igen lényeges kiválasztásos keményedő ötvözetek esetén az egylépcsős módszereknél sokkal pontosabb kétlépcsős tárolt energia mérés nem alkalmazható.

A kétlépcsős módszerek — mind az izotermikus, mind a dinamikus kalorimetria — a tárolt energia felszabadulásának hőmérséklet- és időfüggéséről is ad információkat, ami nagyon lényeges előny az egylépcsős mérésekkel szemben. Ezen információk birtokában ugyanis olyan paramétereket határozhatunk meg, amelyek lehetővé teszik a folyamat egyes szakaszaiban eltűnő kristályhibák azonosítását, sőt következtethetünk ezek mennyiségére is.

Nemrégiben több intézet részvételével tárolt energia méréseket végeztek azonos minőségű, azonos körülmények között alakított mintákon [28]. A méréseket a következő 5 különböző kaloriméteren végezték el.

- I. A 2.2. pontban ismertetett Broxtermann—Grewe—Kappeler-féle kaloriméter [18].
- II. Kereskedelemben kapható DUPONT DSC 900 típusú kaloriméter.
- III. A 2.2. pontban ismertetett elektronsugár fűtésű kaloriméter [19, 20].
- IV. Kereskedelemben kapható ARION gyártmányú adiabatikus kaloriméter.
- V. Kereskedelemben kapható ARION gyártmányú DTA berendezés.

A méréssorozatnál szobahőmérsékleten 65 % keresztmetszet csökkenésig hengerelt 99,997 % tisztaságú ELMORE gyártmányú rezet, valamint csavarással deformált 99,999 % tisztaságú DEGUSSA gyártmányú rezet vizsgáltak. A csavarásnál 13,5 mm átmérőjű, 150 mm hosszú próbatesteket használtak, a minta felületén a nyírás, $\gamma = 1,75$ volt. Az eltérő konstrukciójú kaloriméterekben a mért minták alakja

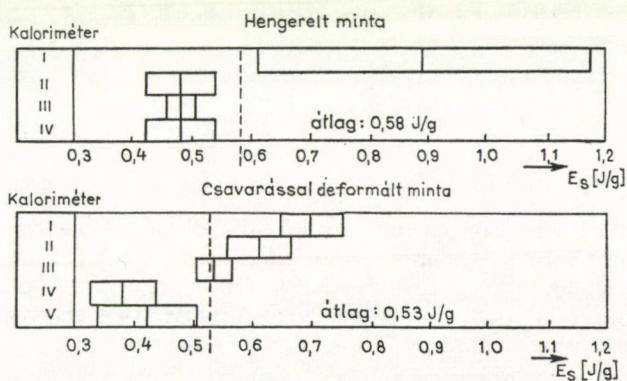
és tömege meglehetősen különböző volt. A mérési eredményeket az 1. táblázat tartalmazza.

A mérések eredményeinek sematikus ábrázolása az 5. ábrán látható. Az ábrából kitűnik, hogy a kapott eredmények az egyes kutató csoportok által megadott hibahatárokon túl is eltérnek, amiből az következik, hogy az összehasonlított kalóriaméterek esetén még ismeretlen szisztematikus hibák állhatnak fenn. A csavarással deformált minta igen homogén és finomszemcsés volt, és ezen mintákból valamennyi kalóriaméterhez optimális alakú próbatesteket lehetett készíteni. Az egyes mérések átlagértéke ebben az esetben 0,53 J/g, a maximális eltérés 0,17 J/g, azaz 33 %. Ez azt mutatja, hogy a tárolt energia mérésre használt különböző kalóriamétereken nyert eredmények még azonos minta vizsgálata esetén is elég jelentős eltérést mutathatnak elsősorban a minták különböző alakja és tömege miatt.

A méréssorozat eredményéből nyilvánvaló, hogy a különböző berendezésekkel, elvileg azonos, de különböző helyeken gyártott és deformált mintákon kapott tárolt energia értékek még a jelenlegi legjobb berendezések esetén is akár 100 %-os eltérést is mutathatnak.

1. TÁBLÁZAT

Minta	Kalori- méter	E_s (J/g)	$\Delta E_s/E_s$ (%)	T_{max} (K)	Fűtési seb. K/min.	Mérések száma	Minta tömege (g)
Hengerelt réz	I	0,89	31	568	72	4	1
	II	0,48	12	531	25	15	0,1
	III	0,48	5	499	1,3	2	22,3
	IV	0,48	12	490	2,5	3	0,6
Csavarással deformált réz	I	0,70	7,5	523	50	3	10
	II	0,61	12	507	25	22	0,1
	III	0,53	6	448	1,3	2	3,5
	IV	0,38	15	463	3	1	0,4
	V	0,42	20	473	3	5	0,9



5. ábra. Az összehasonlító méréssorozat eredményeinek sematikus ábrázolása

3. A TÁROLT ENERGIA MENNYISÉGÉT ÉS FELSZABADULÁSÁT BEFOLYÁSOLÓ TÉNYEZŐK

A tárolt energia mennyiségét és felszabadulását ugyanazon tényezők befolyásolják, mint az alakítás hatására kialakuló szerkezetet, valamint a megújulási és újrakristályosodási folyamatokat. Mivel jelen cikksorozat egyes cikkei a leglényegesebb tényezők hatását részletesen elemzik, mi itt szinte csak felsorolásszerűen ismertetjük azokat. Az egyes paraméterek hatására vonatkozó vizsgálatok összefoglalása megtalálható *Bever, Holt és Titchener* könyvében [2]. A tárolt energia mennyiségét részben a deformációs folyamat, részben a vizsgált anyag jellemzői határozzák meg. A deformációs folyamat paraméterei közül lényeges az alakítás mértéke, hőmérséklete, sebessége, típusa és a folyamat menete. A legtöbb vizsgálat a deformáció mértékének függvényeként adja meg a tárolt energiát, ezzel kapcsolatban már szóltunk arról a problémáról, hogy sem a létrehozott maximális deformáció, sem az alakítási munka nem állapotjelző és így a különböző vizsgálatok eredményeinek összehasonlítása elég bizonytalan. Egy-egy konkrét vizsgálatban azonban az $E_s(\epsilon)$ vagy az $E_s(W)$ függvényből igen lényeges megállapításokat lehet tenni az alakított szerkezet tulajdonságaira, elsősorban a diszlokációk energiaviszonyaira [2, 20, 22, 23, 29–32]. A vizsgált fém jellemzői közül a szemcseszerkezet, a tisztaság, az adalékok és ötvözők mennyisége és eloszlása a leglényegesebb tényezők.

A tárolt energia felszabadulásáról a kétlépcsős módszerek adnak felvilágosítást. A tárolt energia felszabadulására hatással vannak természetesen mindazok a tényezők, melyek a tárolt energia mennyiségét befolyásolják, továbbá a kitemperálás, azaz a második lépcső jellemzői, elsősorban a hőmérséklet az izotermikus és izokron vizsgálatoknál, valamint a fűtési sebesség a változó hőmérsékletű vizsgálatoknál. A kétlépcsős vizsgálatokból az aktiválási energia meghatározásával, valamint más paraméterek mérésével összevetve a tárolt energia felszabadulási folyamatokat, következtethetünk az egyes szakaszokban eltűnő kristályhibák típusára és mennyiségére. A felszabadulási folyamatok részleteivel kapcsolatban előző munkákra utalunk [33, 34].

4. A TÁROLT ENERGIA MÉRÉSEK ÉRTELMEZÉSE

A hidegen alakított fémek esetén a folyási feszültség és a diszlokációszerkezet között szoros kapcsolat van. Számos kísérlet bizonyította, hogy az $E_s(\epsilon)$ és a $\frac{dE_s}{dW}(\epsilon)$

függvények nagyon hasonlóak a $\sigma(\epsilon)$ és $\frac{d\sigma}{d\epsilon}(\epsilon)$ függvényekhez, amiből következik, hogy a tárolt energia is szoros kapcsolatban áll a diszlokációszerkezettel. Röntgen és elektronmikroszkópi vizsgálatok, valamint a mechanikai jellemzők mérése igazolta, hogy a tárolt energia legnagyobb része az újrakristályosodással egyidejűleg szabadul fel. Következésképpen a tárolt energia az újrakristályosodás során eltűnő diszlokációk energiájával azonosítható.

Clareborough és munkatársai már az ötvenes évek elejétől kezdve használták a tárolt energia mérések eredményeit a diszlokációsűrűség meghatározására [29–32]. A tárolt energia mérésekkel párhuzamosan más paramétereket is vizsgáltak (kemény-

ség, ellenállás, sűrűség, stb.) és a kapott diszlokációsűrűség adatok jól egyeznek a későbbi transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatokból nyert adatokkal.

Bailey és Hirsch voltak az elsők, akik direkt kísérleti bizonyítékot szolgáltatottak arra, hogy a diszlokációkhoz rendelt tárolt energia arányos a diszlokációsűrűséggel [22–23]. Ugyancsak ők állapították meg, hogy a folyási feszültség arányos a diszlokációsűrűség négyzetgyökével és így a tárolt energia arányos a feszültség négyzetével. Ez utóbbi összefüggést kísérletileg már jóval korábban megállapították [4, 5]. Bailey és Hirsch vizsgálataikat ezüstön végezték, a tárolt energia méréseket folyásfeszültség méréssel és transzmissziós elektronmikroszkópi (TEM) vizsgálatokkal egészítették ki. Megállapították, hogy a rekristallizációt megelőzően is jelentős energiafelszabadulás játszódik le, anélkül, hogy a diszlokációk szerkezetében vagy sűrűségében lényeges változás állna be. A TEM felvételek cellás diszlokációszerkezetet mutattak, csaknem valamennyi diszlokáció a cellafalakban helyezkedett el, így a tárolt energiát a felhalmozódott diszlokációk energiájával kell azonosítani, amiben a saját energián kívül jelentős szerepe lehet a diszlokációk közötti kölcsönhatási energiának.

Egyetlen egyenes diszlokáció hosszegységre eső sajátenergiáját az

$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0} + \text{mag járulék} \quad (4)$$

kifejezés adja, ahol K értéke 1 és $(1-\nu)$ közé esik, R és r_0 a külső, illetve a belső levágási sugár [34]. Cellákba rendeződött diszlokációk esetén a kölcsönhatási energiát pozitívnak tekinthetjük, ha egy egységnyi hosszúságú diszlokációszakasz energiája nagyobb, mint $(\mu b^2/4\pi K) \ln(R/r_0)$, ahol R a cellák átlagos mérete.

Ha az E_s tárolt energia és az N diszlokációsűrűség között megfigyelt arányosságot az

$$E_s = \alpha_s \mu b^2 N \quad (5)$$

kifejezéssel írjuk le, akkor a kölcsönhatási energia pozitív, nulla vagy negatív aszerint, hogy az α_s paraméter értéke nagyobb, egyenlő vagy kisebb, mint $(\ln R/r_0)/4\pi K$. Bailey és Hirsch megállapítása szerint a folyásfeszültségre fennáll a

$$\sigma = \alpha \mu b N^{1/2} \quad (6)$$

összefüggés, ahol az α állandó értéke kb. 0,5. Így az (5) és (6) egyenletek alapján

$$\alpha_s = \frac{\alpha^2 E_s \mu}{\sigma^2}. \quad (7)$$

Ez viszont azt jelenti, hogy a tárolt energia és a folyásfeszültség méréséből a diszlokációk közötti kölcsönhatás jellegére következtethetünk. Tiszta fémek esetén α -kísérletileg meghatározott értékei általában 2 és 3 közé esnek [2], míg $(\ln R/r_0)/4\pi K$ értéke kb. 1, a kölcsönhatási energia tehát pozitív.

A tárolt energiával kapcsolatos vizsgálatok egy jelentős része az E_s/W , illetve a dE_s/dW mennyiségekre vonatkozó kísérleti eredmények elméleti értelmezésével foglalkozik. Ez a megközelítés általában bonyolultabb, mint az $E_s - \sigma^2$ kapcsolat vizsgálata, mivel ezen mennyiségek a deformáció nagyságától is függenek. Egy jellegzetes példaként *Nabarro és munkatársai* számításait ismertetjük [35]. Az (5) összefüggésnek megfelelően

$$dE_s = \alpha_s \mu b^2 dN. \quad (8)$$

A deformációs munka növekménye egy elemi deformációs lépés során

$$dW = \sigma d\varepsilon = \frac{d\varepsilon}{d\sigma} \sigma d\sigma. \quad (9)$$

A (6) összefüggést is felhasználva

$$\frac{dE_s}{dW} = \frac{2\alpha_s d\sigma}{\alpha^2 \mu d\varepsilon}. \quad (10)$$

Ha pl.

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{\mu}{500}; \alpha_s = 2,5 \quad \text{és} \quad \alpha = 0,5, \quad \text{akkor} \quad \frac{dE_s}{dW} \simeq 4\%,$$

ami jól egyezik a kísérletileg megfigyelt értékekkel. A (10) egyenlet alapján érthető a dE_s/dW és $d\sigma/d\varepsilon$ paraméterek között számos szerző által megfigyelt arányosság is.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

A tárolt energiára vonatkozó vizsgálatokból levonható következtetéseket összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az újrakristályosodással párhuzamosan felszabaduló energia a diszlokációk energiájával azonos. Ezért a tárolt energia a rekristallizációban alapvető szerepet játszik. Valószínű, hogy a diszlokációk jelentős mértékben hozzájárulnak az újrakristályosodást megelőzően lejátszódó megújulási folyamatok során felszabaduló energiához is, de ilyenkor más kristályhibák (elsősorban ponthibák) is jelentős járulékot adhatnak. A ponthibákkal kapcsolatos az is, hogy a diszlokációk relatív szerepe az energiatárolásban csökken, ha az alakítást egyre alacsonyabb hőmérsékleteken végzik.

Az előzőekben tárgyaltak alapján elmondhatjuk, hogy a tárolt energia és a kristályhibák közötti kapcsolat alapjai tisztázottak, a részletekben azonban még számos probléma vár tisztázásra. Különösen távol állunk még attól, hogy egy adott deformációs folyamat eredményeként várható szerkezetet és az ennek megfelelő tárolt energiát elméleti úton előre megadhassuk. Problémát jelent az is, hogy az említett nagy kísérleti bizonytalanságok miatt a rendelkezésre álló tárolt energia adatok nem alkalmasak arra, hogy segítségükkel az egymástól eltérő elméleti modellek helyességéről megalapozottan dönteni lehessen.

IRODALOM

1. R. O. Williams, *Experimental Methods of Materials Research*, ed. H. Herman, Vol. 1. John Wiley, New York, 1967. p. 251.
2. M. B. Bever, D. L. Holt and A. L. Titchener, *Progr. Mat. Sci.* 17, 1, 1973.
3. P. Charbonnier and J. Galy-Aché, *Mémorial de l'Artillerie de la Marine*, 28, 391, 1900.
4. H. Hort, *Z. Ver. Dtsch. Ing.* 50, 1831, 1906.
5. H. Hort, *Mitt. Forsch. Arb. Ing.* 41, 1, 1907.
6. R. O. Williams, *Rev. Sci. Instr.* 31, 1336, 1960.
7. R. O. Williams, *Acta Met.* 9, 949, 1961.
8. R. O. Williams, *Trans. AIME*, 224, 719, 1962.
9. R. O. Williams, *Trans. AIME*, 227, 1290, 1963.
10. R. O. Williams, *Rev. Sci. Instr.* 34, 639, 1963.
11. R. O. Williams, *Acta Met.* 13, 163, 1965.
12. A. Wolfenden and A. S. Appleton, *Rev. Sci. Instr.* 38, 826, 1967.
13. I. Kovács, *Internat. Symposium Reinstoffe in Wissenschaft u. Technik*, Dresden, 1965, Vol. 3., p. 719 (1967).
14. L. L. J. Chin and N. J. Grant, *Powder Metallurgy*, 10, 344, 1967.
15. S. Misra, B. W. Howlett and M. B. Bever, *Trans. Met. Soc. AIME*, 223, 749, 1965.

16. J. S. L. Leach, *Physicochemical Measurements in Metals Research*, (ed. R. A. Rapp,) Vol. 4, Pt. 1, Interscience, New York, 1970. p. 197.
17. H. A. Skinner (editor), *Experimental Thermochemistry*, Vol. 2., Interscience, New York, 1962.
18. J. Broxtermann, H. G. Grewe and E. Kappler, *Z. Metallkde*, 62, 867, 1971.
19. H. Steffen and H. Wollenberger, *Rev. Sci. Instr.* 44, 937, 1973.
20. H. Steffen, G. Gottstein and H. Wollenberger, *Acta Met.* 21, 683, 1973.
21. G. Borelius, S. Berglund and O. Asvan, *Ark. Fys.* 2, 551, 1951.
22. J. E. Bailey and P. B. Hirsch, *Phil. Mag.* 5, 485, 1960.
23. J. E. Bailey and P. B. Hirsch, *Proc. Roy. Soc. A267*, 11, 1962.
24. F. Bell and O. Krisement, *Z. Metallkde*, 53, 115, 1962.
25. F. Bell, *Acta Met.* 13, 363, 1965.
26. L. B. Ticknor and M. B. Bever, *Trans. Amer. Inst. Min. (Metall.) Engrs*, 194, 941, 1952.
27. B. W. Howlett, J. S. L. Leach, L. B. Ticknor and M. B. Bever, *Rev. Sci. Instr.* 33, 619, 1962.
28. G. Gottstein, H. Steffen, W. Hemminger, G. Hoschek, K. Broxtermann, H. G. Grewe and E. Lang, *Scripta Met.* 9, 791, 1975.
29. L. M. Clareborough, M. E. Hargreaves and M. H. Loretto, *Acta Met.* 6, 725, 1958.
30. L. M. Clareborough, E. M. Hargreaves, D. Mitchel and G. W. West, *Proc. Roy. Soc. A215*, 507, 1952.
31. L. M. Clareborough, E. M. Hargreaves and M. H. Loretto, *Phil. Mag.* 6, 807, 1961.
32. L. M. Clareborough, E. M. Hargreaves and M. H. Loretto, *Phil. Mag.* 7, 115, 1962.
33. Kovács I. és Benkő L., *Magy Fiz. Folyóirat*, 12, 31, 1964.
34. Kovács I. és Zsoldos L., *Diszlokációk és képlékeny alakváltozás*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965. p. 36.
35. F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski and D. B. Holt, *Advances in Physics*, 13, 193, 1964.

6. MEGÚJULÁSI FOLYAMATOK FÉMEKBEN

UNGÁR TAMÁS

ELTE, Általános Fizika Tanszék, Budapest

TARTALOM

1. Bevezetés	447
2. Diszlokáció dipólok eltűnése	448
3. A diszlokáció sűrűség és a tárolt energia csökkenése	450
4. A primer rekrisztallizáció közben lejátszódó megújulás	452
5. Az alakítási keményedés megújulása	454
6. Poligonizáció és szubhatár képződés	457
7. Szennyezők hatása a megújulásra	459
8. Összefoglalás	461
9. Irodalom	462

1. BEVEZETÉS

A hideg alakítás különböző módozataival a legváltozatosabb diszlokáció szerkezetek hozhatók létre fémekben és ötvözetekben. Az alakítási keményedéssel megnövelt folyáshatár az alakítást követő alkalmas hőkezeléssel gyakorlatilag csaknem tetszőleges mértékben csökkenthető. Az eközben lejátszódó folyamatot mindaddig, amíg nem indul meg a rekrisztallizáció, megújulásnak nevezzük. A hidegen alakított állapot megújulása során, az alakítással létrehozott diszlokáció szerkezet átrendeződése, illetve bizonyos mértékű eltűnése zajlik le.

Természetes, hogy a megújulás során nem csak a mechanikai tulajdonságokban következik be változás, hanem minden olyan fizikai tulajdonságban is, amely érzékeny a diszlokációk eloszlására és sűrűségére. A megújulás tanulmányozása szempontjából a legfontosabb ilyen tulajdonságok a fajlagos elektromos ellenállás, a tárolt energia és a röntgen vonalak kiszélesedése. A megújuláskor lejátszódó diszlokáció átrendeződés és eltűnés közvetlen megfigyelésére a transzmissziós elektron mikroszkópia (TEM) nyújt lehetőséget.

A megújulási folyamatok egy másik csoportja az edzéssel, ill. alakítással létrehozott ponthibák eltűnése. Ezzel a jelenséggel azonban ebben a dolgozatban nem kívánok foglalkozni.

Az elmúlt néhány évtizedben számos összefoglaló dolgozat adott áttekintést a megújulással kapcsolatos jelenségekről. A megújulásról, szubszemcsenövekedésről és a rekrisztallizációról Beck adott összefoglaló áttekintést [1]. A megújulást ekkor még homogén folyamatnak tekintették, határfelületek elmozdulása nélkül. Már akkor megállapították, hogy a megújulás sebessége kezdetben a legnagyobb és a folyamat előrehaladásával fokozatosan csökken [2]. Azt találták, hogy a megújulásnak nincs

inkubációs periódusa és a különböző fizikai tulajdonságok kinetikai vizsgálatából meghatározták a folyamat aktiválási energiáját [3, 4]. TEM vizsgálatok azt mutatták, hogy a kisszögű dőlt határok elmozdulhatnak külső feszültség hatására, ugyanakkor a mozgásuk sebessége lecsökken az illeszkedési szög növekedésével [5]. Közvetlen módon megfigyelték a diszlokációk átrendeződését hajlított Fe—Si egykristályokon [6]. Számos TEM és maratási vizsgálat igazolta az ellentétes előjelű diszlokációk eltűnését, ugyanakkor az azonos előjelű diszlokációk falakba történő tömörülését, ami a poligonizáció jól ismert jelensége [7]. Ugyancsak TEM vizsgálatok mutatták azt, hogy szubhatárok összeolvadhatnak γ találkozásuk mozgása révén, továbbá szubszemcsék egyesülhetnek egyetlen, nagyobb szubszemcsévé [8].

A hideg alakításkor keletkező tárolt energiának a megújulás során bekövetkező felszabadulását *Titchener és Bever* [9], valamint *Williams* [10] vizsgálták kiterjedten. Az eredmények mennyiségi elemzésében komoly nehézséget jelent az alakított, ill. a megújult állapotokhoz tartozó diszlokáció elrendeződés és sűrűség meghatározásának kérdése. Ebben a tekintetben elsősorban a TEM és a vonalprofil analízis vizsgálatok hozhatnak előrelépést [11, 12].

A szennyezőknek a megújulás késleltetésére vonatkozóan számos hazai kutató végzett alapvető vizsgálatokat [13—16].

A megújulási folyamat egyes szakaszainak felosztására mind a mechanikai tulajdonságok, mind a diszlokáció szerkezetben bekövetkező változások szempontjából történtek próbálkozások [17—19]. A kétféle szempont összeegyeztetésére *Hasegawa és Kocks* végzett szakító és TEM vizsgálatokat [20].

2. DISZLOKÁCIÓ DIPÓLOK ELTŰNÉSE

A hidegen alakított állapot kilágyítása során az alakítással bevitt nagyszámú diszlokáció jelentős része rövid távú elmozdulás révén eltűnik az anyagból. Ez azt jelenti, hogy az egymáshoz közel levő, ellentétes előjelű diszlokációkból álló dipólok eltűnése jelentős szerepet játszik a megújulási folyamatban.

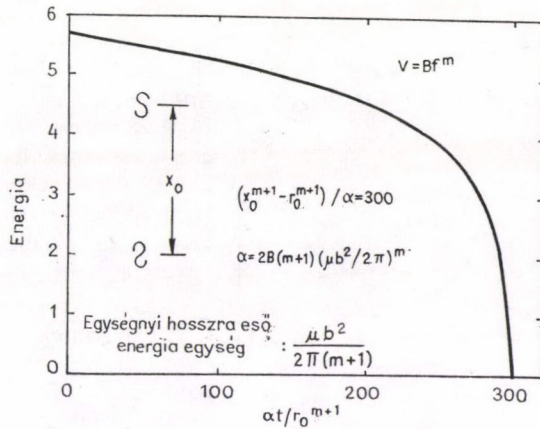
Csavardiszlokáció dipólok eltűnésének kinetikája egyszerűen meghatározható a diszlokáció elmélet alapján és közvetlenül összevethető LiF kristályokon végzett vizsgálatokkal [21]. Egymástól x távolságra fekvő két ellentétes csavardiszlokáció között működő vonzóerő a következő módon adható meg [22]:

$$f = \frac{\mu b^2}{2\pi x}, \quad (1)$$

ahol μ a nyírási modulusz és b a Burgers vektor. Felhasználva, hogy egy diszlokáció átlagos sebessége a rá ható erő valamilyen hatványával fejezhető ki [23], a dipól-távolság időfüggésére a következő adódik:

$$x_0^{m+1} - x^{m+1} = \alpha t, \quad (2)$$

ahol m a diszlokációra ható erő hatványkitevője a sebességformulában $\alpha = 2B(m+1)(\mu b^2/2\pi)^m$ (itt B a diszlokáció mozgékonyasága, vagyis az egységnyi erő által létrehozott sebesség) és x_0 a dipólt alkotó két diszlokáció távolsága a kezdeti pillanatban. (Az ilyen távolságot az egyszerűség kedvéért a továbbiakban dipól-távolságnak fogjuk nevezni.)



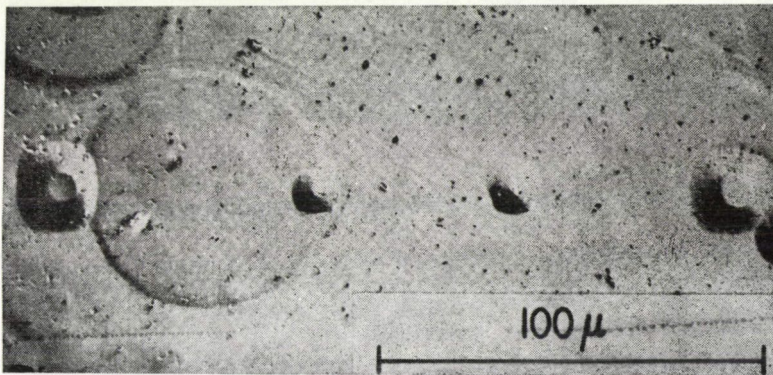
1. ábra. Csavardiszlokáció dipólok energiafelszabadulásának kinetikája

A diszlokáció elmélet alapján a csavardiszlokáció dipól energiája az alábbi módon adható meg [22]:

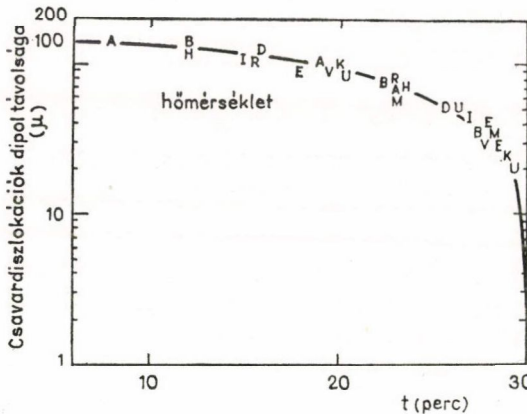
$$\Delta E = (\mu b^2 / 2\pi) \ln \frac{x}{r_0}, \quad (3)$$

ahol r_0 a levágási rádiusz. A (2)-es kifejezést (3)-ba helyettesítve megkapjuk a csavardiszlokáció dipól energiájának időfüggését, amit alkalmas paraméterek mellett az 1. ábra mutat.

A fentiek igazolására Lee, Hu és Li [24] megvizsgálták csavardiszlokáció dipólok eltűnésének időfüggését LiF egykristályon. A dipólok mozgását maratási ábrákon figyelték meg, amint ez a 2. ábrán látható. Az ábrán a lapos fenekű maratási kúpok jelzik a dipól kezdeti, míg a hegyes kúpok a hőkezelés utáni helyzetét. Nagy-



2. ábra. Csavardiszlokáció dipól mozgása kilággyító hőkezelés hatására LiF kristályban



3. ábra. Csavardiszlokációk dipól-távolságának időfüggése 140 °C-on LiF kristályban

számú maratási kísérletet elvégezve meghatározták a dipól-távolság időfüggését. Eredményeiket a 3. ábra mutatja. Az egyes betűk az egy-egy független mintán végzett mérések eredményeinek felelnek meg. Az 1. és 3. ábrák összevetéséből, figyelembe véve a (3)-as összefüggést, jól látható az elmélet és a tapasztalat egyezése.

Él és kevert diszlokáció dipólokra a fentiekhez hasonló, bár lényegesen bonyolultabb elméleti megfontolások szintén elvégezhetők, ezekre azonban a jelen dolgozat keretein belül nem térünk ki.

3. A DISZLOKÁCIÓ SÚRÚSÉG ÉS A TÁROLT ENERGIA CSÖKKENÉSE

Az eddigiekben egyetlen dipól eltűnését írtuk le. Ahhoz, hogy egy alakított mintában meghatározhatassuk a dipólsűrűség változását, statisztikai leírásra van szükség. Az előző vizsgálat azt mutatta, hogy az x távolságú dipól eltűnése során az x^{m+1} mennyiség időben lineárisan változik. Kézenfekvő tehát a dipól-távolság eloszlást olyan eloszlásfüggvénnyel leírni, amelynek a változója x^{m+1} . Ennek megfelelően a pillanatnyi dipólsűrűség a következő módon írható fel [21]:

$$\varrho_t = \int_{r_0^{m+1}}^{\infty} \Phi_t(x^{m+1}) d(x^{m+1}). \quad (4)$$

A (2) egyenletet figyelembe véve belátható, hogy a dipólsűrűség csökkenésének sebessége a következő:

$$-\frac{d\varrho_t}{dt} = \alpha \Phi_t(r_0^{m+1}). \quad (5)$$

A sűrűségeloszlások hasonlóságából adódik továbbá, hogy:

$$\Phi_t(r_0^{m+1}) = \Phi_0(r_0^{m+1} + \alpha t). \quad (6)$$

Ez azt jelenti, hogy az egymással nem kölcsönható dipólok dipól-távolságának eloszlását megkaphatjuk a dipólsűrűség időfüggésének a méréséből. Ugyanez megfordítva is igaz, miszerint a távolságeloszlás ismeretéből a dipól eltűnés kinetikája már meghatározható.

Az alakítás során létrejövő dipólok keletkezési mechanizmusának elemzése alapján Li az alábbi kezdeti dipól-távolság eloszlást vezette le [21]:

$$\Phi_0(x_0^{m+1}) = \frac{\alpha}{k} (x_0^{m+1})^{\frac{-4}{m+1}}, \quad (7)$$

ahol α -t (2)-ben definiáltuk, k pedig újabb állandó.

A (4)–(6) egyenletek a dipól eltűnés kinetikájára a következőt adják:

$$\frac{d\varrho}{dt} = -\frac{\alpha^2}{k} (r_0^m + 1 + \alpha t)^{\frac{-4}{m+1}}. \quad (8)$$

Tárolt energiamérésekkel többen megfigyelték a fenti kinetikát és azt találták, hogy m értéke 1 vagy 3 [4, 10, 24]. $m=1$ esetén a (8) egyenlet egyenértékű az alábbi egyszerű másodrendű kinetikával:

$$\frac{d\varrho}{dt} = -k\varrho^2. \quad (9)$$

Li megmutatta, hogy nem teljesen kölcsönhatásmentes diszlokációmodellből kiindulva is lényegében ugyanez a másodrendű kinetika adódik. Érthető ezért, hogy a legtöbb tárolt energia és diszlokációsűrűség eltűnési kinetika leírható a (9) típusú egyenlettel.

A (9) egyenletet integrálva a következő adódik:

$$\frac{1}{\varrho} - \frac{1}{\varrho_0} = kt, \quad (10)$$

ahol ϱ_0 a kiindulási diszlokációsűrűség. *Sankaran és Li* LiF egykristályon 1%-os deformációt hajtottak végre a köbös tengely irányában történő összenyomással. Az alakítást követő 500 °C-os hőkezelés során kitemperálódó diszlokációsűrűséget vizsgálták a hőkezelés időtartamának függvényében. A (10)-nek megfelelő ábrázolásban egyenest kaptak. Vizsgálataikból a sebességállandóra $k = 1,7 \cdot 10^{-11}$ cm²/sec adódott [25].

A tárolt energia eltűnésére vonatkozóan *Williams* végzett egylépcsős-kaloriméteres vizsgálatokat [10]. A termoelemre függesztett mintát két azonos, lengő kalapács ütése deformálja. A mintának az ütést követő felmelegedése a tárolt energia felszabadulásából adódik (5. fejezet). A hőmérséklet emelkedés kinetikája ily módon a tárolt energia felszabadulás kinetikáját adja meg. Fe, Ni, Pb és Zr egykristályokon végzett vizsgálatok eredménye a 4. ábrán látható. Az ábrából kitűnik, hogy a százalékban kifejezett felszabaduló energia reciproka lineáris függvénye az időnek, ami a (10) kinetikának megfelelő viselkedés, ha feltételezzük, hogy az E tárolt energia arányos az alakítással bevitt diszlokációsűrűséggel.

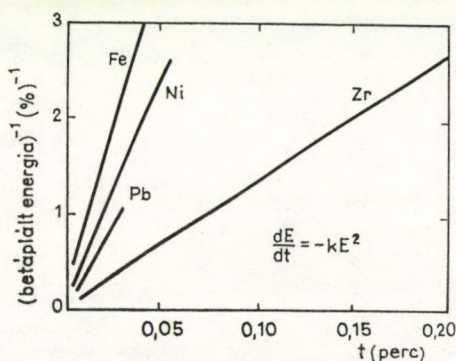
Hosszú időtartamok esetén ϱ sokkal kisebb, mint ϱ_0 , és (10) a következőképpen egyszerűsödik:

$$\frac{1}{\varrho} = kt, \quad (11)$$

vagy

$$\frac{d\varrho}{dt} = -\frac{1}{kt^2}. \quad (12)$$

Ha ϱ E -vel arányos, akkor a tárolt



4. ábra. Tárolt energia felszabadulásának időfüggése különböző fémekben

energia felszabadulás sebességének $-1/t^2$ -tel arányosan kell változnia. *Vandermeer* és *Gordon* ilyen kinetikát találtak alumínium egykristályon végzett kaloriméteres vizsgálatok alapján [26]. Eredeti munkájukban a tárolt energia felszabadulást szubszemcse növekedéssel hozták kapcsolatba, azonban figyelembe véve a diszlokációs-sűrűség eltűnésre vonatkozó kinetikai eredményeket, kézenfekvőbb ezt az energia-felszabadulást diszlokáció eltűnésnek tulajdonítani.

4. A PRIMER-REKRISZTALLIZÁCIÓ KÖZBEN LEJÁTSZÓDÓ MEGÚJULÁS

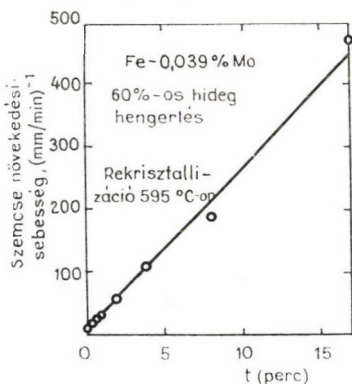
Amennyiben elfogadjuk, hogy a rekrisztallizáció során a szemcsenövekedés hajtóereje a tárolt energia, továbbá, hogy a növekedés sebessége arányos a hajtóerővel, akkor megmutatható, hogy a rekrisztallizációs szemcsenövekedés sebessége elég hosszú idő után t^{-1} -gyel arányosan változik. Ilyen szemcsenövekedési kinetikát számos szerző megfigyelt [27–31]. Feltételezve tehát, hogy a G szemcsenövekedési sebesség arányos a ΔF hajtóerővel és a (10) egyenletben q -t ΔF -fel helyettesítve G időfüggésére a következő adódik:

$$\frac{1}{G} = \frac{1}{k_G} \left(\frac{1}{\Delta F_0} + k_R t \right), \quad (13)$$

ahol k_G a szemcsenövekedéshez tartozó lineáris, míg k_R a megújulásnak megfelelő másodrendű sebesség állandó. ΔF_0 a rekrisztallizáció hajtóereje a kezdeti pillanatban. A (13) egyenlet azt jelenti, hogy G^{-1} lineáris függvénye az időnek egy izoterm rekrisztallizációs vizsgálat során. Az 5. ábra egy Fe-0,039 at.%Mo minta szemcsenövekedési kinetikáját mutatja a (13) egyenletnek megfelelően [28]. *Leslie és munkatársai* [28] eredetileg $\ln G - \ln t$ ábrázolásban mutatták be mérési eredményeiket, ami jelentős eltérést adott az egyenestől. *Li* mutatott rá, hogy a (13) szerinti ábrázolás lényegesen jobb a kétszeres logaritmikus ábrázolásnál. Hasonlóan jól lehetett linearizálni *English és Backofen* Fe—Si mintán kapott eredményeit [29], amint ez a 6. ábrán látható. Ugyanilyen meggyőzően bizonyítják a (13) kinetika érvényességét *Graham és Cahn* Al egykristályokon végzett vizsgálatai [32]. A fenti eredmények azt jelentik, hogy a szemcsenövekedéssel egyidőben lejátszódik egy másodrendű kinetikával jellemezhető folyamat. A legkézenfekvőbb az a feltevés, hogy a szemcsenövekedéssel párhuzamosan így járulékos diszlokáció eltűnés is végbemegy az anyagban, ami egy megújulási folyamat eredménye.

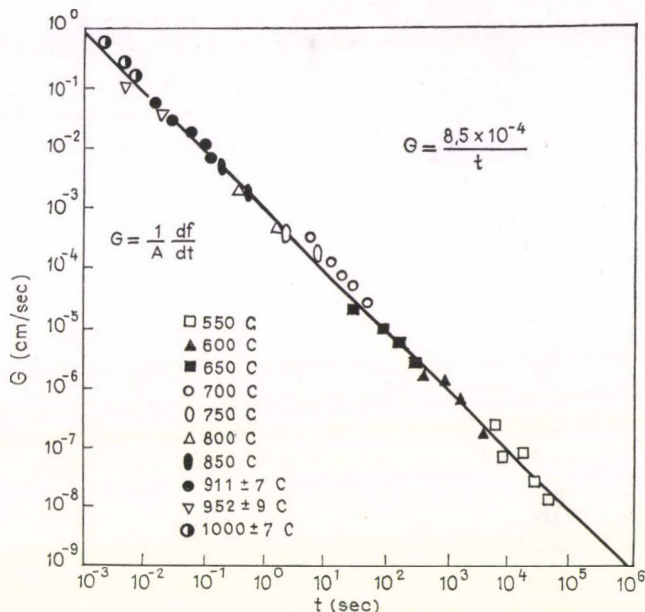
Figyelemre méltó következtetés vonható le a (13) kifejezéssel megadott kinetika hosszú időtartamokhoz tartozó viselkedéséből. Ilyenkor (13) a következő egyszerű alakban írható:

$$G = \frac{k_G}{k_R t}. \quad (14)$$



5. ábra. Szemcseátmérő növekedési sebességének időfüggése a primer rekrisztallizációs szakaszban, Fe—Mo ötvözetben

Ez azt jelenti, hogy amennyiben pl. szennyezők ugyanolyan mértékben befolyásolják a szemcsehatár mozgékonyt, mint a megújulás másodrendű sebességállandóját, a szemcsehatár mozgás sebessége szennyezőktől függetlenné válik. *Leslie és munkatársai* Fe—Mn és Fe—Mo mintában végzett vizsgálatai jól igazolják ezt a hatást [27, 28]. A szennyezők hatása ilyenkor elsősorban a rekrisztallizált szemcsék nukleációjában mutatkozik meg. Más szóval a rekrisztallizált szemcsék nukleációját késleltetik, de a további növekedésre nincs hatásuk.



6. ábra. A szemcsehatár mozgás sebességének kinetikája különböző hőmérsékleteken a primer rekrisztallizációs szakaszban Fe—3,25% Si ötvözetben, 60%-os hideg alakítás után

Hasonló hatása lehet a hőmérsékletnek. Ugyanis, ha a szemcsenövekedésnek és a megújulásnak ugyanolyan az aktiválási energiája, más szóval, ha k_G és k_R hőmérsékletfüggése azonos, akkor a (14) kifejezés hőmérsékletfüggetlenné válik. Jól mutatják ezt a viselkedést *Speich és Fisher* [30] 3,25%Si-t tartalmazó Fe—Si ötvözetben végzett primer-rekrisztallizációs vizsgálatai. A 6. ábrán látható, hogy az $\ln G - \ln t$ ábrázolásban valamennyi mérési pont egyetlen egyenes mentén fekszik, annak ellenére, hogy a rekrisztallizációs hőmérséklet 550 és 1000 °C között változik. Ez ismét azt jelenti, hogy a hőmérséklet hatása a primer-rekrisztallizációban döntően a rekrisztallizált magok keletkezésében, nem pedig a növekedési sebességben jelentkezik.

Abban az esetben, ha a szemcsenövekedés sebessége nem lineáris függvénye a hajtóerőnek, akkor az eddigi megfontolások bizonyos mértékig módosulnak, bár a szennyezők, ill. a hőmérséklet hatása a szemcsenövekedési sebesség kinetikájára ekkor sem változik meg. Legyen ugyanis G a ΔF hajtóerőnek valamilyen hatványfügg-



7. ábra. A megújulás egymást követő szakaszai Fe—3,25% Si ötvözetben, 60%-os hícég alakítást követő 700 °C-os hőkezelés során

A primer-rekrisztallizáció közben lejártszódó diszlokáció eltűnést egyértelműen mutatják a 7. ábrán látható TEM felvételek. Jól megfigyelhető a Fe—3,25%Si mintákon végzett 60%-os redukciót követő 700 °C-os rekrisztallizációs hőkezelés időtartamának függvényében az egyes rekrisztallizált szemcséken belül a diszlokációk fokozatos eltűnése [30].

5. AZ ALAKÍTÁSI KEMÉNYEDÉS MEGÚJULÁSA

Miután az alakítást követő magasabb hőmérsékletű hőkezelések során minden esetben a diszlokáció sűrűség csökkenése figyelhető meg, kézenfekvő lenne azt várni, hogy ilyenkor az alakítási keményedés, ill. a folyáshatár is csökken a folyáshatár és a diszlokáció sűrűség közötti ismert egyértelmű kapcsolat miatt. A megújulási folyamatok során azonban a tapasztalat szerint nincs ilyen közvetlen összefüggés a folyáshatár és a diszlokáció sűrűség között [21, 33]. Ez az oka annak, hogy az alakítási keményedés megújulásának mikromechanizmusa ma is sok tekintetben tisztázatlan kérdés, annak ellenére, hogy számos vizsgálat történt az alakítási keményedés megújulása és a diszlokáció szerkezet kapcsolatának meghatározására.

A 8. ábra Fe—Si egykristályokon végzett megújulási vizsgálatok eredményeit mutatja [34]. A mintákat 80%-os hengerlés után 25 perces izokron hőkezeléseknek vetették alá. A hengerlés két különböző kristálytani irányban történt, így lehetőség volt mind az alakítási keményedés, mind a megújulás anizotrópiájának a tanulmányozására. Az ábrán feltüntetett Miller indexek a hengerlési irányokat jelentik. Látható, hogy a minták sűrűsége sokkal alacsonyabb hőmérséklettartományban újul meg,

vénye, akkor a következőt írhatjuk:

$$G = k_G (\Delta F)^n. \quad (15)$$

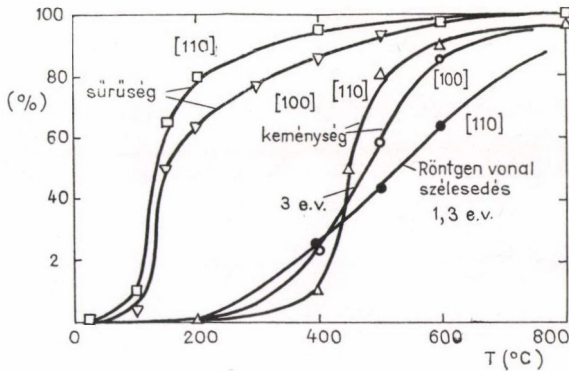
Ebben az esetben a megfigyelt $G \sim t^{-1}$ összefüggés azt jelenti, hogy a megújulási kinetikát az alábbi alakban kell felírni:

$$\frac{d\Delta F}{dt} = -k_R (\Delta F)^{n+1}. \quad (16)$$

Ilyen kinetikát számos szerző megfigyelt $n > 1$ kitevő mellett is [4, 24, 26]. A fenti két kifejezésből G időfüggésére a következő adódik [21]:

$$G = \frac{nk_G}{k_R t}. \quad (17)$$

Ez az összefüggés mind a szennyező, mind a hőmérséklet hatása szempontjából teljesen azonos módon viselkedik, mint a (14) egyenlet.



8. ábra. Különböző tulajdonságok megújulása százalékos arányban kifejezve, 25 perces izokron hőkezelések során, 80%-osan hidegen alakított Si—Fe mintákban

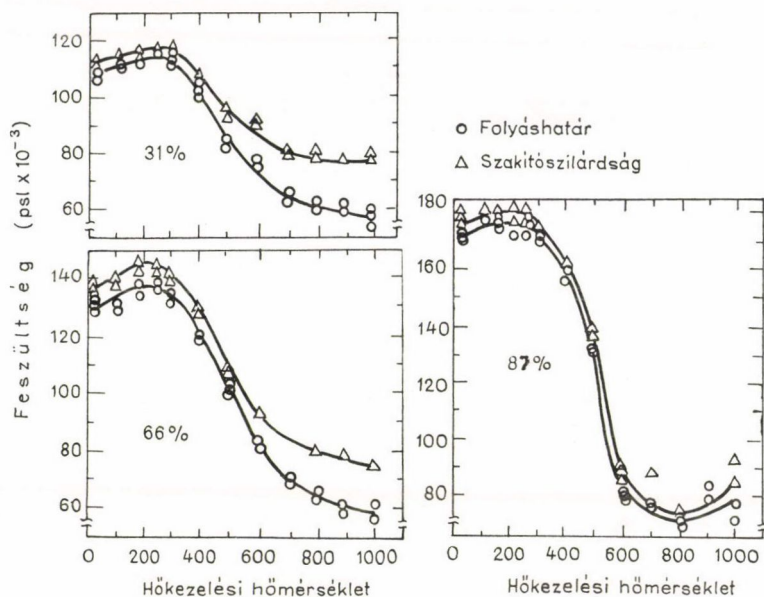
mint a keménység, vagy a röntgen vonalszélesedés. Ez azt mutatja, hogy a pontthiták, döntően a vakanciák, mintegy 150 °C körül kezdenek mozogni a vizsgált mintában. A diszlokációmozgás ennél lényegesen magasabb hőmérsékleten indul meg. A keménységmérések mintegy 3, míg a röntgen vonalszélesség vizsgálatok 1,3 eV-os aktiválási energiát eredményeztek. Ez jól mutatja, hogy a két fizikai mennyiség változása alapvetően más mikromechanizmust tükröz.

Fe—3,2%Si huzalok folyáshatárának és szakítószilárdságának megújulását vizsgálta Comerford és Thomas [35]. Hideg húzással 31, 66 és 87%-ig redukált minták kilágýtási görbéi láthatók a 9. ábrán. A hőmérséklet növekedésével kezdetben a folyáshatár növekedése figyelhető meg. Szembetűnő ugyanakkor, hogy az a hőmérséklettartomány, amelyben a megújulás végbemegy, nem függ az előzetes alakítás mértékétől. A kezdeti folyáshatár növekedés valószínűleg a mechanikai feszültség hatása alatti öregítésnek tulajdonítható.

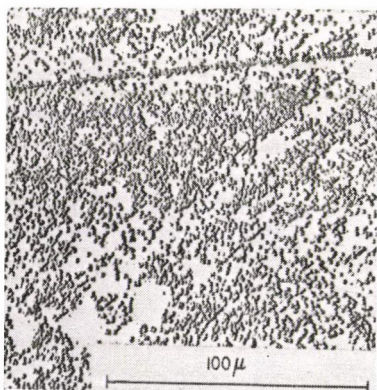
A latens keményedés megújulására vonatkozó vizsgálatok jelentős mértékben járulhatnak hozzá az alakítási keményedés megújulása mikromechanizmusának megértéséhez. Zn egykristályok mechanikai tulajdonságait vizsgálták Edwards és munkatársai [36, 37]. Azt találták, hogy két ekvivalens, de egymással valamilyen szöget bezáró csúszási síkban egymás után végrehajtva az alakítást, a második alakításhoz szükséges kritikus csúsztató feszültség jelentősen meghaladta az elsőt. Hasonló megfigyeléseket tett, többek között, Kocks Al és Ag egykristályokon [38]. Azt találta, hogy az első csúszási rendszer folyáshatára és a latens keményedés között 1,0 és 1,3 közötti faktor tetszőlegesen előfordulhat, látszólag függetlenül a latens rendszer megválasztásától.

A latens keményedés annak tulajdonítható, mint erre Li rámutatott [39], hogy az elsőként aktivizált csúszási rendszerben mozgó diszlokációk az összekuszálódás révén lecsökkentik a mozgásra képes primer diszlokációk számát a latens rendszerben. Ennek igazolására Santaran, Li és Natada végeztek vizsgálatokat LiF egykristályokon [39]. A 10a ábra a maratással láthatóvá tett diszlokáció eloszlást mutatja valamelyik könnyű csúszás irányában végrehajtott 1%-os alakítás után. A 10b ábrán az elsővel 60°-os szöget bezáró, ugyancsak könnyű csúszási irányban (ez most a la-

tens rendszer) létrehozott 1%-os deformáció hatása látható. Az ábrából jól kitűnik, hogy a latens rendszert ugyanolyan alakításhoz jelentősen nagyobb diszlokáció sűrűség létrejöttére van szükség, mint az első csúszási rendszerben, ami érthetővé teszi a folyáshatár megnövekedését. Az ábrából az is látható, hogy míg az első alakításkor viszonylag egyenletes, addig a latens keményedés során sávos diszlokáció eloszlás alakul ki. Ez utóbbi esetben az alakítás az egyes sávok határvonalának a továbbmoz-



9. ábra. Fe—3,25% Si ötvözet mechanikai tulajdonságainak megújulása 30 perces izokron hőkezelések során, különböző mértékű hideg alakítások után



10. ábra. Diszlokációk maratási képe LiF egykristályban az elsődleges (a), ill. a latens rendszerben (b) egymás után létrehozott 1—1%-os alakítás után

gásával megy végbe, hasonlóan a Lüder sávokhoz. A latens keményedéshez tartozó magas folyáshatár mellett az alakítási keményedés mértéke gyakorlatilag zérus.

A latensen keményedett rendszer megújulását a 11. ábra mutatja. Itt a 10b ábrán bemutatott állapotot követő 500 °C 2 órás hőkezelés után kapott maratósi kép látható. A latens rendszer sávjai még nyomokban felfedezhetők, de alapjában véve a diszlokáció eloszlás homogén és a diszlokációsűrűség jelentősen lecsökkent. A megújulás során tehát mind az első, mind a latens rendszerben jelentős mértékű diszlokáció eltűnés megy végbe. A homogén megújulást alátámasztja, hogy mind az első, mind a latens rendszerben történő újraalakítás során, alacsony folyáshatár mellett az alakítási keményedés mértéke ismét jelentős.



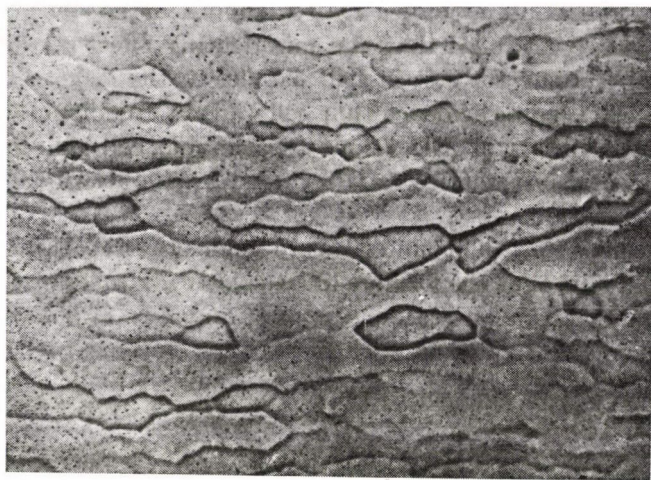
11. ábra. A 10b ábrán bemutatott állapot maratósi képe 500 °C 2 órás megújító hőkezelés után

6. POLIGONIZÁCIÓ ÉS SZUBHATÁR KÉPZŐDÉS

A diszlokáció dipólok eltűnésével egyidőben, ill. azt követően az azonos előjelű többlet diszlokációk a kilágyítás során diszlokáció falakba tömörülnek. Az így kialakuló diszlokáció szerkezet energetikailag kedvezőbb, mint a véletlenszerű eloszlás, így ennek a folyamatnak a hajtóereje is a tárolt energia, amely a folyamat során csökken. A diszlokációátrendeződéssel kialakuló diszlokációfalakat általában szubhatároknak nevezzük. Ezek a határok egymáshoz koherensen illeszkedő, ugyanakkor feszültségmentes tartományokat választanak el egymástól. A legegyszerűbb szerkezetű szubhatárok meghajlított, majd kilágyított egykristályban keletkeznek, éldiszlokációk falakba történő rendeződése révén. Ilyenkor a falakra merőleges irányú kristálytani tengely a falakon kissé megkötve halad keresztül. A meghajlított kristályban enyhén görbülő kristályvektor a kilágyítás után egy sokszög egy részéhez hasonlóan tört vonalakból tevődik össze. Ennek alapján nevezte a folyamatot Orowan polygonizációnak [7].

A szubhatár képződés a diszlokáció átrendeződés egyik leggyakoribb formája. Lényeges jellemzője, hogy gyakorlatilag minden diszlokációmozgással járó folyamatban megfigyelhető, tehát az alakítástól a primer rekristallizációig.

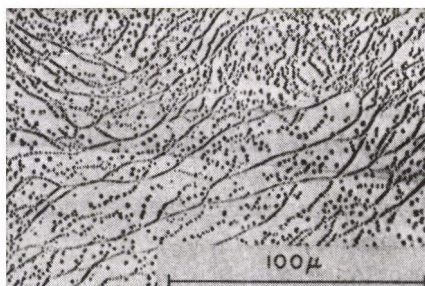
A 12. ábra poligonizált szubhatárok maratási képét mutatja alumínium egykristályban [40]. A hajlításnak alávetett egykristályban a poligonizáció azért megy végbe az ábrán látható egyértelmű módon, mert a hajlító igénybevételkor keletkező húzott, ill. összenyomott tartományok alakváltozását csak olyan, azonos előjelű éldiszloká-



12. ábra. Hajlított, majd kilágyított Al egykristályban a szubhatárok maratási képe 70-szeres nagyításban

ciók képesek kompenzálni, amelyeknek dilatált zónái a húzott, ill. komprimált zónái az összenyomott tartományok felé irányultak. A hajlítást követő kilágyítás során az így keletkező éldiszlokációk a hajlítás irányára merőlegesen összecúsznak.

Bonyolultabb alakítás során a poligonizáció révén kialakuló szubszemcsék sokkal változatosabb képet is mutathatnak. A 13. ábrán elsődlegesen, majd latensen alakított, végül megújulási hőkezelésnek alávetett LiF kristály maratási képe látható. A bonyolult alakváltozásnak kitett mintában poligonizálódott többlet diszlokációk (nem dipólok) változatos szubhatár szerkezetet eredményeztek [21].



13. ábra. Poligonizált diszlokáció szerkezet maratási képe bonyolult módon alakított LiF egykristályban

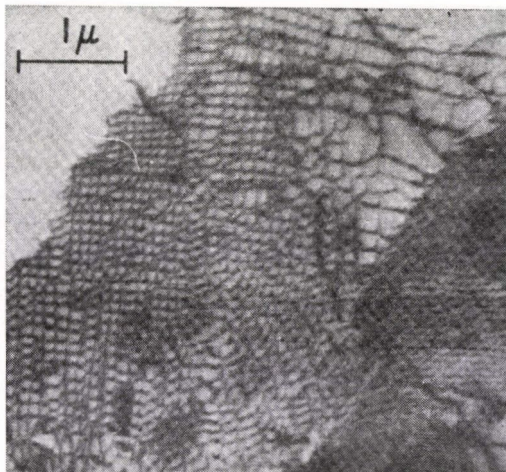
A szubhatárok mozgása, keletkezése és eltűnése a megújulási folyamatokban lényeges szerepet játszik. A viszonylag nagy számú csúszási rendszer és az alakítás különböző módjai igen változatos diszlokáció reakció típusokat tesznek lehetővé. Így érthető, hogy nehéz általános elveket találni a szubhatár képződésre, ill. a szubhatárokból álló szubszerkezet ki-

alakulására. A 14. ábra 10%-os nyújtással alakított, majd 160 °C-on 100 órát hőkezelt nagytisztaságú Al-ban keletkező szubhatár háló TEM képét mutatja [41].

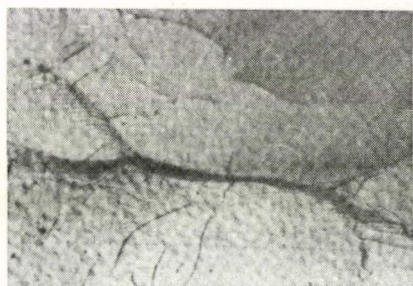
Szubhatárok összeolvadása ún. Y találkozási pontok mozgása révén mehet végbe, ami a 15. ábrán jól megfigyelhető [42]. α Fe-ban két szubhatár egyetlen szubhatárrá egyesül, miközben egy-egy Y találkozási pont végigmegy a két szubhatáron.

Szubszemcsék csoportosulását és egyetlen nagyobb szubszemcsévé történő egyesülését mutatja a 16. ábra hidegen alakított, majd kilágyított Fe—Si egykristályban [43].

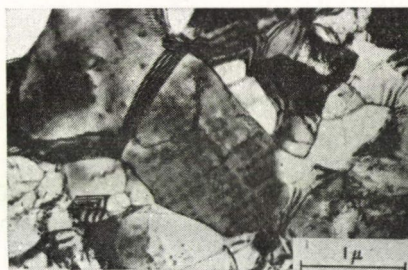
A szubszerkezetek szilárdságnövelő hatásáról egy korábbi dolgozat ad áttekintést [44]. A szubszerkezetek megújulása mind az alakítás, mind a kilágyítás módjának változatos lehetőségei miatt a legkülönbözőbb módokon mehet végbe. Ezen folyamatok mikromechanizmusának a vizsgálata ma is a kutatás tárgya.



14. ábra. Négyzethálós szubhatár szerkezet 10%-os húzással alakított, majd 160 °C-on 100 órát hőkezelt nagytisztaságú Al-ban



15. ábra. Szubhatárok összeolvadása Y találkozási pont mozgása révén α Fe-ban

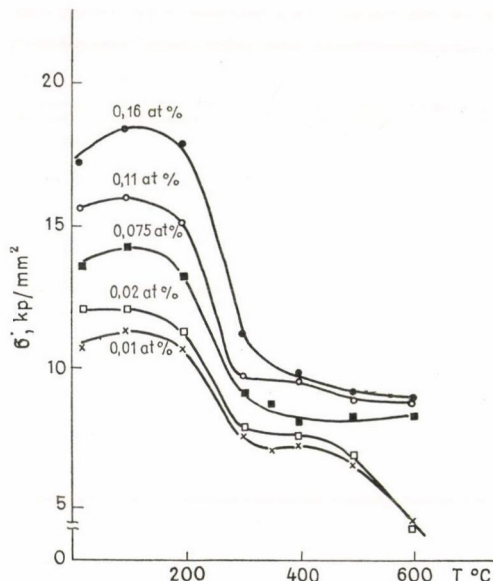


16. ábra. Szubszemcsék csoportosulása egyetlen nagyobb szubszemcsévé hengerelt, majd kilágyított Fe—Si mintában

7. SZENNYEZŐK HATÁSA A MEGÚJULÁSRA

A szennyező-diszlokáció kölcsönhatásnak a megújulási folyamatban is döntő szerepe van. Bizonyos esetekben az alakítást követő hőkezelések hatására az oldott szennyezők olyan diszlokáció rögzítő hatást fejthetnek ki, hogy a szilárdság csökkenése helyett szilárdságnövekedés figyelhető meg. Ez a jelenség az ún. lágyítási keményedés.

A 17. ábra a valódi feszültség változását mutatja a lágyítási hőmérséklet függvényében, nagytisztaságú Al alapon készült Al—Fe ötvözetekben [14]. Az egyes hőmérsékleteken az izokron hőntartási idő 1 óra volt. A rúdalakú, öntött minták lágyító hőkezelését 99%-ra történő hideg alakítás előzte meg. A Fe tartalom növekedése a folyáshatár növekedését eredményezi valamennyi vizsgált hőmérsékleten. Ugyanakkor látható, hogy mintegy 200 °C-ig σ értéke valamennyi ötvöző koncentráció



17. ábra. A valódi feszültség változása hideg alakítást követő lágyítási hőmérséklet függvényében, különböző Fe tartalmú Al—Fe ötvözetekben. Az izokron hőntartás időtartama 1 óra

kításkor keletkezett diszlokációk körül Cottrell felhőket hoznak létre. Ezzel a folyamattal egyrészt lecsökken a diszlokáció eltűnés valószínűsége, másrészt a diszlokációk körül felhalmozott szennyező atomok rögzítik a diszlokációkat. A megújulást tehát gyakorlatilag felváltja a kilágyítási keményedés. A magas szilárdsági tulajdonságok csak a rekrisztallizációs szakaszban csökkennek jelentős mértékben.

Hasonló jelenség figyelhető meg Cr hatására Al-ban folyáshatár és elektromos ellenállás mérésekkel [16]. A hideg alakítást követő egy-egy órás izokron lágyító hőkezelés függvényében a folyáshatár változását a 18. ábra mutatja. Látható, hogy $\sigma_{0,2}$ az egyes hőmérsékleteken monoton nő az adalék tartalom növekedése közben. Ezzel egyidőben a 0,03%-os és ennél nagyobb Cr tartalom mellett a hőmérséklet növekedésével, kis kezdeti folyáshatár csökkenés után, $\sigma_{0,2}$ jelentős növekedése tapasztalható, ami 200 és 300 °C között maximumot ér el, majd magasabb hőmérsékleteken a rekrisztallizáció miatt erőteljesen lecsökken. A 0,01%, vagy ennél kisebb Cr tartalmú minták folyáshatára monoton csökken a hőmérséklet növekedésével. A csökkenés mértéke a 0,01% Cr tartalom mellett 200 °C-ig kicsiny, magasabb hőmérsékleteken erősen megnő és 300 °C-on $\sigma_{0,2}$ eléri a legalacsonyabb értékét. Ezen a mintán jól

mellett kissé nő és csak egy maximum elérése után kezd rohamosan csökkenni. A mechanikai vizsgálatokkal párhuzamosan végzett ellenállás mérések szerint a minták ötvöző tartalma szilárd oldat állapotban marad a folyáshatár növekedése közben. Vassel és K. Csetényi szerint a szilárdság kezdeti növekedése a hidegalakításkor keletkező ponthibák hatásának tulajdonítható. A képlékeny alakításkor keletkező vakanciák az alakítás után már szobahőmérsékleten és a további hőkezelés során még inkább elősegítik a túltelített oldott Fe zónákba való tömörülését. Az így keletkezett zónák a későbbi szakításkor akadályokat jelentenek az elmozduló diszlokációk számára. Nagyon valószínű azonban, hogy még az alakítással megnövelt vakancia koncentráció mellett sem alakulnak ki Fe zónák 200 °C-on, vagy annál alacsonyabb hőmérsékleteken. Ezt támasztják alá egyébként a szerzők ellenállás mérései is. Sokkal valószínűbb, hogy a Fe atomok a megnövekedett mozgékonyaságuk révén a hideg ala-

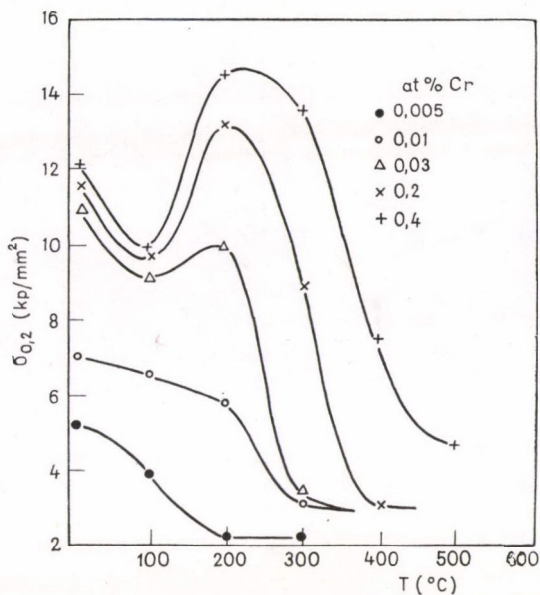
széttagolódik a megújulási és a rekrisztallizációs szakasz. A nagyobb Cr tartalmú ötvözetekben a kezdeti folyáshatár csökkenés a normális megújulási folyamatnak felel meg. Megindul a diszlokáció dipólok eltűnése és az azonos előjelű többletdiszlokációk szubhatárokbá rendeződnek. Ezt a folyamatot megszakítja a Cr diffúziójának 100 °C körüli jelentősebb megindulása. A párhuzamosan végzett ellenállás mérések tanúsága szerint a Cr változatlanul szilárd oldat állapotban marad. A $\sigma_{0,2}$ erőteljes növekedése ezek után csak azzal magyarázható, hogy az alakítással bevitt és már meglévő, viszonylag nagyszámú diszlokáció körül a Cr atomok Cottrell felhőt alkotnak, ezzel rögzítve a diszlokációkat.

A kilágyítási keményedést vizsgálta Cu alapú ötvözetsorozaton Vitek és Warlimont [45]. A 19. ábrán a σ_{BE} rugó hajlítási határ (német szabvány DIN 50 151) látható 50% hideg hengerlést követő 1—1 órás kilágyítás után. Jól megfigyelhető a kilágyítási keményedés a 4at% ötvöző tartalom hatására. A kilágyítási keményedés mértéke az egyes ötvözőknek az Al mátrixban való különböző mozgékonyaságától, ill. az egyes ötvözők szennyeződiszlokáció kölcsönhatásának különböző mértékétől függően más és más.

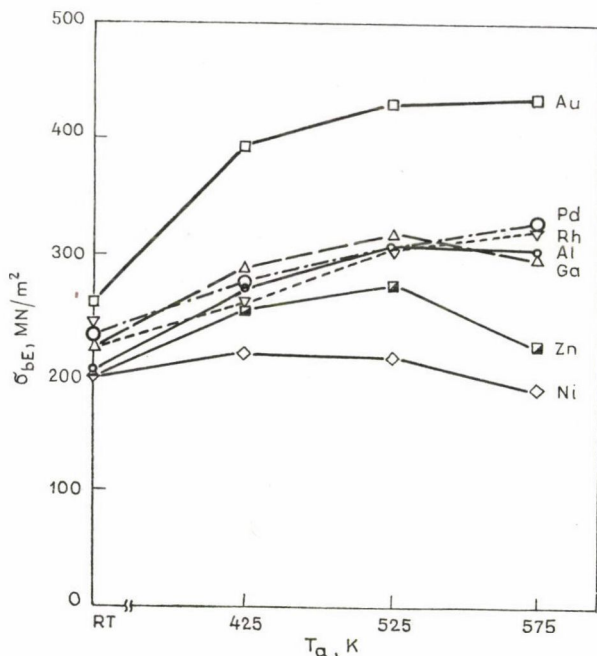
A szennyezőknek a megújulásra gyakorolt hatásáról tehát megállapíthatjuk, hogy amennyiben a megújulási szakaszban jelentősen megnő valamilyen szennyező atomnak a mozgékonyasága, akkor az, a diszlokáció-szennyező közötti, mindig vonzó kölcsönhatás miatt olyan szennyező eloszlás változást eredményez, ami rögzíti az előzetes alakítással bevitt nagy diszlokációsűrűséget, másrészt akadályozza a diszlokációmozgást, végeredményben a mechanikai tulajdonságok megújulása helyett a lágyítási keményedésre vezet. Az így elért kedvező mechanikai tulajdonságok csak valamilyen még magasabb hőmérsékleten történő hőkezeléssel ronthatók le, általában már a primer rekrisztallizációs szakaszban.

8. ÖSSZEFOGLALÁS

A hideg alakítással létrehozott magas szilárdsági tulajdonságok az anyagban felhalmozódott diszlokációk nagy sűrűségére, valamint az összekuszálódás miatt bekövetkező rögzítettségére vezethetők vissza. Az alakításkor végzett munka egy része a diszlokációk feszültségterében raktározódik el, mint tárolt energia. A hideg alakítást követő magasabb hőmérsékletű lágyító hőkezelések során a nagyszűrűségű, kusza diszlokáció szerkezet jelentős átrendeződésen mehet keresztül. Egyrészt a diszlokáció dipólok eltűnése, vagy kioltása révén a diszlokációk jelentős része megszűnhet, másrészt



18. ábra. A folyáshatár változása Al—Cr ötvözetekben a hideg alakítást követő 1—1 órás izokron hőkezelés hőmérsékletének függvényében



19. ábra. Rugó hajlítási határ (német szabvány DIN 50 151) változása 50 %-os hideg alakítást követő 1 órás lágyító hőkezelés hőmérsékletének függvényében 4 at% ötvözt tartalmazó különböző Cu alapú ötvözetekben

a nem párosával előforduló többletdiszlokációk szubhatárokbá, diszlokáció falakba tömörülhetnek. Ez utóbbi diszlokáció elrendeződéshez tartozó feszültségtér energia tartalma jelentősen kisebb lehet a véletlenszerű elrendeződésnek megfelelőhöz képest. Végeredményben mindkét folyamat során csökken a tárolt energia, ami megfordítva a folyamat hajtóereje. Ezzel egyidőben tiszta anyagok esetében a folyáshatár csökkenése figyelhető meg.

Amennyiben a diszlokáció mozgással, ill. eltűnéssel kapcsolatos folyamatokat minden esetben megújulásnak tekintjük, úgy jelentős megújulás megy végbe általában a primer rekristallizációs szakaszban is, amikor a primeren rekristallizált szemcsék még korántsem diszlokáció — és ennek megfelelően — feszültségmentesek.

A túltelített szilárdoldat állapotot metastabilan fenntartani képes ötvözetekben a szennyező-diszlokáció kölcsönhatás révén olyan szennyező felhő alakulhat ki a diszlokációk körül, amely képes megakadályozni a diszlokációknak mind az eltűnését, mind a mozgását. Az ilyen anyagokban a megújulási szakaszban szilárdság növekedés figyelhető meg, ami az ún. kilágyítási keményedés.

IRODALOM

1. P. A. Beck, *Advances in Phys.* 3, 254, 1954.
2. R. Dronard, J. Washburn and E. Parker, *Trans. AIME*, 197, 1226, 1953.
3. D. Kuhlmann, G. Masing and J. Raffelsieper, *Z. Metallkde.*, 40, 241, 1949.
4. G. Borelins, S. Berghund and S. Sjöberg, *Ark. Fys.* 6, 143, 1952.
5. D. W. Bainbridge, C. H. Li and E. H. Edwards, *Acta Met.* 2, 322, 1954.
6. W. R. Hibbard and C. G. Dunn, *Creep and Recovery*, ASM, 1957. p. 14.

7. *E. Orowan*, Communication to Congress de la Societe Francaise de la Metallurgie d'Octobre, 1947.
8. *Hsun Hu*, Trans AIME, 224, 75, 1962.
9. *A. L. Titchener and M. B. Bever*, Progr. Met. Phys. 7, 247, 1958.
10. *R. O. Williams*, Trans AIME, 224, 719, 1962.
11. *M. Wilkens*, Krist. Technik, 11, 1159, 1976.
12. *L. M. Clareborough, M. E. Hargreaves and M. H. Loretto*, Recovery and Recrystallization of Metals, Interscience, New York, 1963. p. 63.
13. *E. Kovács-Csetényi, K. R. Vassel and I. Kovács*, Kristall u. Technik, 4, 83, 1969.
14. *Vassel K. R. és K. Csetényi Erzsébet*, FKI Közl. 10, 131, 1971.
15. *F. J. Kedves, E. Kovács-Csetényi and L. Gergely*, Phys. stat. sol. (a) 14, 561, 1972.
16. *E. Kovács-Csetényi and I. Kovács*, Phys. stat. sol. (a) 21, K25, 1974.
17. *J. T. Michalak and H. W. Paxton*, Trans. TMS-AIME, 221, 850, 1961.
18. *T. E. Tietz, C. L. Meyers and J. L. Lytton*, Trans. TMS-AIME, 224, 339, 1962.
19. *T. H. Alden*, Metall. Trans. 4, 1047, 1973.
20. *T. Hasegawa and U. F. Kocks*, Acta Met., 27, 1705, 1979.
21. *J. C. M. Li*, Recrystallization, Grain Growth and Textures, ed. H. Margolin, ASM, Cleveland 1966. p. 45.
22. *I. Kovács and L. Zsoldos*, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
23. *W. G. Johnston and J. J. Gilman*, J. Appl. Phys. 30, 129, 1959.
24. *H. U. Aström*, Acta Met. 3, 508, 1955.
25. *S. Sankaran and J. C. M. Li*, Recrystallization, Grain Growth and Textures, ed H. Margolin, ASM, Cleveland, 1966. p. 59.
26. *R. A. Vandermeer and P. Gordon*, Recovery and Recrystallization of Metals, ed. H. Himmel, Interscience, New York, 1963. p. 211.
27. *W. C. Leslie, F. J. Plecity and J. T. Michalak*, Trans. AIME, 221, 691, 1961.
28. *W. C. Leslie, F. J. Plecity and F. W. Aul*, Trans. AIME, 221, 982, 1961.
29. *A. T. English and W. A. Backofen*, Trans. AIME, 230, 396, 1964.
30. *G. R. Speich and R. M. Fischer*, Recrystallization, Grain Growth and Textures, ed. H. Margolin, ASM, Cleveland, 1966. p. 563.
31. *Rajkovits Zs. és Kovács I.*, Magyar Fizikai Folyóirat, 24, 45, 1976.
32. *C. D. Graham and R. W. Cahn*, Trans. AIME, 206, 504, 1956.
33. *A. S. Keh*, Direct Observation of Imperfections in Crystals, Interscience, New York, 1962. p. 213.
34. *Hsun Hu*, Recovery and Recrystallization of Metals, ed. H. Himmel, Interscience, New York, 1963. p. 269.
35. *M. F. Comerford and D. A. Thomas*, Trans. AIME, 233, 1236, 1965.
36. *E. H. Edwards, J. Washburn and E. R. Parker*, Trans. AIME, 197, 1525, 1953.
37. *E. M. Edwards and J. Washburn*, Trans. AIME, 200, 1239, 1954.
38. *U. F. Kocks*, Trans. AIME, 230, 1160, 1964.
39. *S. Sankaran, J. C. M. Li and Y. Nakada*, Recrystallization, Grain Growth and Textures, ed. H. Margolin, ASM. Cleveland, 1966. p. 75.
40. *R. W. Cahn*, J. Inst. Metals, 76, 121, 1949.
41. *J. L. Lytton, K. H. Westmacott and L. C. Porter*, Trans. AIME, 233, 1757, 1965.
42. *E. Hamburg and M. Gensamer*, Recrystallization, Grain Growth and Textures, ed. H. Margolin, ASM. Cleveland, 1966. p. 82.
43. *Hsun Hu*, Trans. AIME, 224, 75, 1962.
44. *Rajkovits Zs. és Tasnádi P.*, Magyar Fizikai Folyóirat, 27. 255, 1981.
45. *J. M. Vitek and H. Warlimont*, Metall. Trans. 10A, 1889, 1979.

KRISTÁLYSTRUKTÚRÁK CSOPORTELMÉLETE I. PONTCSOPORTOK

MORLIN ZOLTÁN
MTA Kristályfizikai Kutató Laboratórium

1. BEVEZETÉS

Összefoglaló tanulmányunk célja a kristálytani pontcsoportok csoportelméleti levezetése. Kristályok szimmetriatulajdonságait szimmetria elemek és szimmetriaműveletek segítségével írhatjuk le. A pontcsoportok tárgyalásához négy szimmetriaműveletre (rotáció, inverzió, rotoinverzió és tükrözés) van szükség. E műveleteket ismertnek tételezzük fel, s csak annyit jegyzünk meg, hogy a rotációt elsőfajú, a többi másodfajú műveleteknek fogjuk nevezni.

Ha a szimmetriaműveletek a három-dimenziós térben levő motívumokat önmagukkal fedésbe hozzák, az eredmény kongruens leképezés. Kongruens motívumokat elsőfajú műveletek hoznak létre. A másodfajú szimmetriaműveletek eredménye az eredeti motívum enantimorfja: egy jobb motívumból bal motívum lesz, vagy fordítva. Ha például a motívum K , enantimorfja X .

Valamilyen motívum kongruens leképezését egy tengely körüli

$$2\pi, \pi, 2\pi/3, \pi/2, 2\pi/6$$

elforgatás valósít meg. A kristályok világában ezeknek a rotációknak megfelelő tengelyek n fogásszáma $n=1, n=2, n=3, n=4, n=6$. A fogásszámok definíciója: $2\pi/n$.

Inverzióval kombinált rotációt a rotoinverziós tengelyek valósítanak meg. A rotoinverziós szimmetria elemet a fogásszám fölé húzott vonallal jelöljük: $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$.

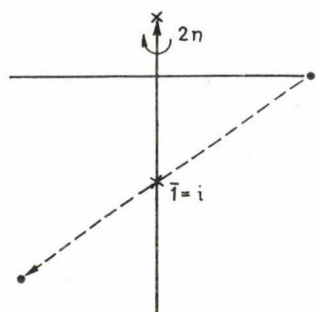
Az 1.1 ábrából közvetlenül látható, hogy $\bar{1}$ az i -vel jelölt inverziós centrummal ekvivalens. Az 1.2 ábra viszont azt szemlélteti, hogy a két-fogású rotoinverzió egy a forgástengelyre merőleges *tükröt* generál (m : tükör).

Más jelöléssel, ha a forgástengely A_α és α az elforgatás szöge

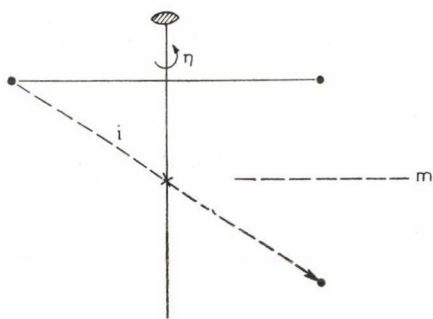
$$\bar{A}_{\alpha=2\pi} = \bar{1} = i, \bar{A}_{\alpha=\pi} = \bar{2} = m.$$

A szimmetriaműveleteket célszerű egy gömbnek a papír síkjában fekvő egyenlítői síkjával, a motívumot pedig, ha a motívum a papírsík fölé esik ponttal, a papír sík alatti motívumot pedig körrel jelölni (1.3 és 1.4 ábrák).

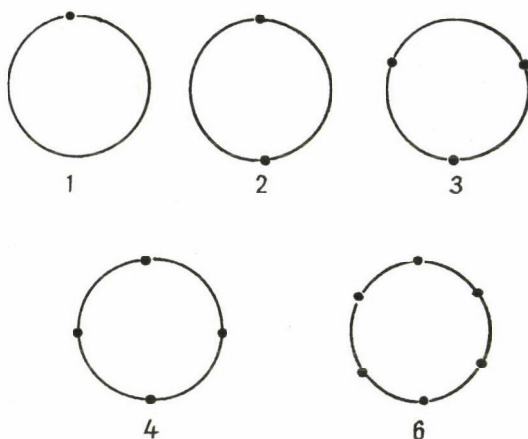
* Érkezett 1981. április 11.



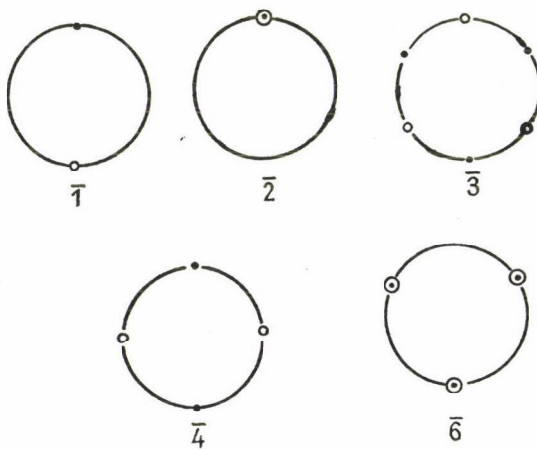
1.1 ábra



1.2 ábra



1.3* ábra



1.4* ábra

* A *-gal megjelölt ábrák M. Buerger, Crystallography c. monográfiájában (4 sz. irodalmi jegyzék) levő megfelelő ábrák engedéllyel átvett utánnymásai.

A jelölési konvencióban a felülhúzott \bar{n} nem ugyanaz, mint a fogásszám inverzióval (i) való kombinációja. Míg \bar{n} rotoinverziós tengely s mint ilyen szimmetria elem, addig $n \cdot i$ két művelet (egy rotáció és egy inverzió) kombinációja. Később kitűnik, hogy például $\bar{2} = m$, viszont $2 \cdot i = 2/m$ (egy tükörre merőleges két-fogású forgástengely).

A továbbiakban geometriailag kimutatjuk, hogy az egyszerű elsőfajú és másodfajú rotációs tengelyek kombinációja csak meghatározott hajlás-szögekben lehetséges. E tengelyek szimmetriaműveleteiről ezután bebizonyítható, hogy algebrai csoportok elemei. Harmadik lépésként a rotációs műveletekből a csoportalgebra segítségével felépítjük a kristallográfiai pontcsoportokat.

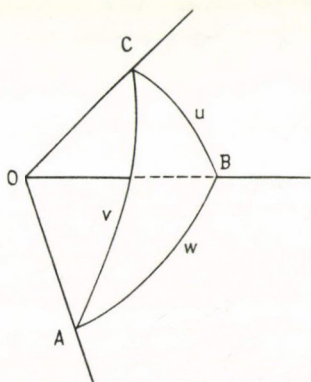
2. KRISTÁLYGEOMETRIA

1. Rotáció. Euler egyenlete

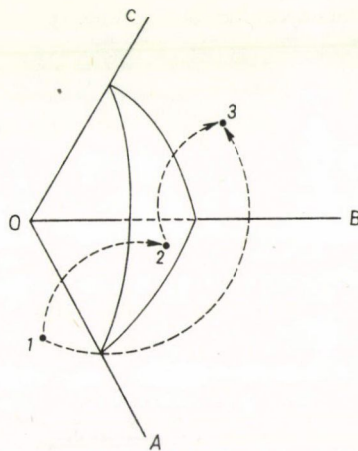
Három egymást metsző, egymással tetszőleges szöget bezáró n -fogásszámú forgástengely metszéspontját helyezzük el egy gömb középpontjába. A három forgástengely A, B és C . A tengelyeknek gömbfelületi dőféspontjai egy gömbháromszöget definiálnak (2.1 ábra). Egy 1-gyel számozott és ponttal jelölt tetszőleges motívum az A tengely körül elforgatva 2., majd a B körüli rotációval a 3. helyzetbe kerül. Másfelől az 1. számú helyen levő motívumot a C tengely körüli elforgatással közvetlenül átvihetjük 1.-ből 3.-ba (2.2 ábra).

Az egyes tengelyek közötti α, β és γ szögek elvileg tetszőlegesek lehetnek, a kristallográfiában azonban csak a forgástengelyek fogásszámának megfelelő értékeket vehetik fel.

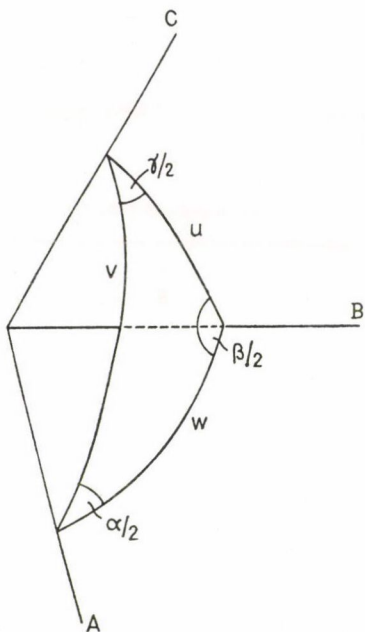
Mivel az A, B és C tengelyeknek a gömbfelülettel való dőféspontjai gömbháromszöget határoznak meg és a motívumok a gömbfelületen mozognak, alkalmazhatjuk



2.1 ábra



2.2 ábra



2.3 ábra

Euler egyenletét (2.3 ábra):

$$\begin{aligned}\cos w &= \frac{\cos \gamma/2 + \cos \alpha/2 \cos \beta/2}{\sin \alpha/2 \sin \beta/2}, \\ \cos u &= \frac{\cos \alpha/2 + \cos \gamma/2 \cos \beta/2}{\sin \gamma/2 \sin \beta/2}, \\ \cos v &= \frac{\cos \beta/2 + \cos \gamma/2 \cos \alpha/2}{\sin \gamma/2 \sin \alpha/2}.\end{aligned}\quad (2.1)$$

A 2.1 egyenletrendszerből a kristallográfiaileg lehetséges α , β és γ szögekkel számolva megkapjuk a három egymást metsző forgástengely kristallográfiaileg megengedett u , v , w hajlásszögeit.

A következő esetek fordulhatnak elő:

a) Három kétfogású tengely kombinációja,

222. Ebben az esetben $n=2$, $\alpha=\beta=\gamma=\pi$

$$\cos w = \frac{\cos \pi/2 + \cos \pi/2 \cos \pi/2}{\sin \pi/2 \sin \pi/2} = 0 \quad (2.2)$$

$$w = A \wedge C = \pi/2,$$

azaz az A és C tengelyek egymásra merőlegesek.

Ugyanezt az eredményt kapjuk a másik két tengelyre:

$$B \wedge C = u = \pi/2, \quad A \wedge B = v = \pi/2.$$

Három egyenként két-fogású tengely kombinációja tehát orthogonális rendszert alkot.

b) Két két-fogású és egy három-fogású tengely kombinációja: 223, $n=2, 2, 3$; $\alpha=\beta=\pi$, $\gamma=2\pi/3$.

Euler egyenlete a megfelelő értékek behelyettesítésével

$$\cos w = \frac{\cos \frac{2\pi}{6} + \cos \pi/2 \cos \pi/2}{\sin \pi/2 \sin \pi/2} = \cos 2\pi/6$$

és

$$w = A \wedge C = \pi/3,$$

$$u = B \wedge C = \pi/2,$$

$$v = A \wedge B = \pi/2.$$

A bemutatott módon kaphatjuk meg a

$$224 (n=2, 2, 4, \quad w=\pi/4, \quad u=v=\pi/2),$$

$$226 (n=2, 2, 6, \quad w=\pi/6, \quad u=v=\pi/2),$$

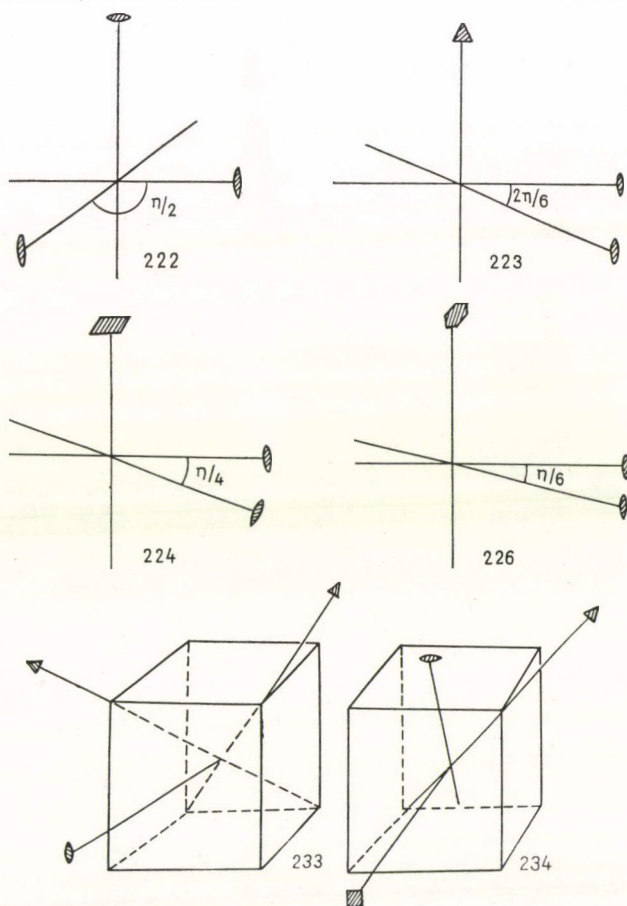
$$233 (n=2, 3, 3, \quad w=v=54^\circ 44', \quad u=70^\circ 32'),$$

$$234 (n=2, 3, 4, \quad w=35^\circ 16', \quad v=45^\circ, \quad u=54^\circ 44')$$

kombinációk egymásközi hajlásszögét. Az eredményeket a 2.4 ábra és az I. táblázat foglalja össze.

I. TÁBLÁZAT

Tengely kombinációk	α°	β°	γ°	u°	v°	w°
222	180	180	180	90	90	90
223	180	180	120	90	90	60
224	180	180	90	90	90	45
226	180	180	60	90	90	30
233	180	120	120	$70^\circ 32'$	$54^\circ 44'$	$54^\circ 44'$
234	180	120	90	$54^\circ 44'$	45°	$35^\circ 16'$



2.4* ábra

Az Euler egyenlet csak ezekre a most tárgyalt kombinációkra szolgáltat értelmes, illetve nem triviális megoldásokat. Ebből következik, hogy valamennyi kristallográfiai pontcsoportnak meg kell felelnie az 1, 2, 3, 4, 6, 222, 223, 224, 226, 233 és 234 rotációs szimmetriák valamelyikének. A rotációs tengelyek és kombinációik szolgáltatják az első 11 pontcsoportot (Schoenflies jelölésük: C_1 , C_2 , C_3 , C_4 , C_6 , D_2 , D_3 , D_4 , D_6 , T és O). A pontcsoport elnevezés onnan ered, hogy a kombinációkban felépítő rotációs tengelyek egymást egy pontban metszik.

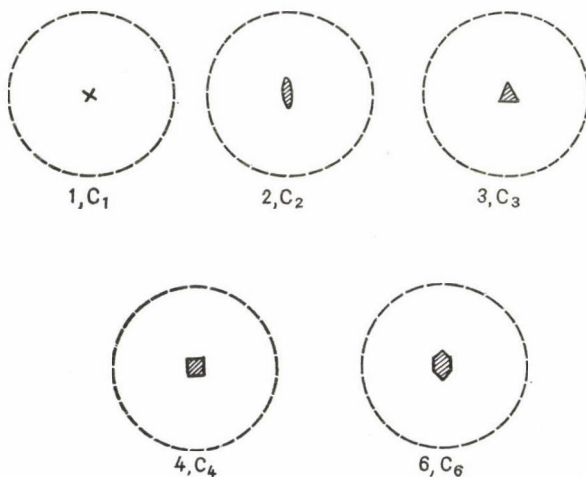
Az eddig tárgyalt pontcsoportok szokásos ábrázolását a 2.5 és 2.6 ábrák szemléltetik. Ezekben az ábrákban is az egyenlítői sík középpontjában levő forgástengelyek a papír síkjára merőlegesek, míg a kerületen jelzett tengelyek a papír síkjában fekszenek. Egyébként a szokásos jelöléseket használjuk, a rotoinverziós tengelyeket a tengelyjelölés közepén levő kör jelzi.

2. Kombinált rotációk eredője

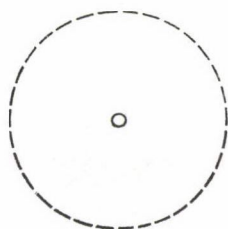
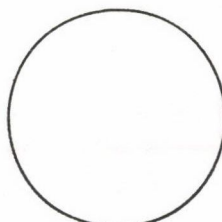
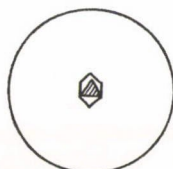
Az előző pontban tárgyalt egyszerű és kombinált rotációs tengelyekről, mint szimmetria elemekről volt szó. Most tekintsük két rotációs szimmetriaművelet kombinációjának eredőjét. Két A_α és B_β rotáció kombinációja egy harmadik C_γ rotáció

$$A_\alpha \cdot B_\beta = C_\gamma. \quad (2.3)$$

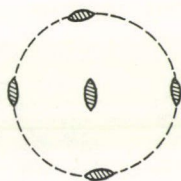
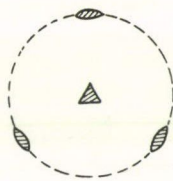
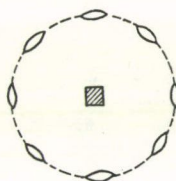
A kombinációt mint műveletet a két A_α és B_β rotáció közé írt ponttal jelezzük és bináris szorzatnak nevezzük, melynek jelentése: „következik”, azaz ebben az esetben a B_β művelet az A_α művelet után következik.



2.5a* ábra

 $C_1, \bar{1} = i$  $C_s, \bar{2} = m$  $C_{3i}, \bar{3}$  $S_4, 4$  $C_{3h}, \bar{6} = \frac{3}{m}$

2.5b* ábra

222
 D_2 223
 D_3 224
 D_4 226
 D_6 233
 T
2.6* ábra234
 O

A két egymás után végrehajtott szimmetriaművelet eredője C_γ .

A 2.3 egyenlet vizsgálatához az Euler egyenletet (2.1) így írjuk fel:

$$\cos \gamma/2 = -\cos \alpha/2 \cos \beta/2 + \sin \alpha/2 \sin \beta/2 \cos w. \quad (2.4)$$

Kérdés, mekkora a γ szög, azaz mi a C_γ tengely fogásszáma.

Ha a 2.2 egyenletben A_α két-fogású ($\alpha=\pi$) és C_γ merőleges az A_α tengelyre ($w=\pi/2$)

$$\cos \gamma/2 = -\cos \pi/2 + \cos \pi/2 \cos \beta/2 \cos \pi/2 = 0$$

azaz

$$\gamma = \pi.$$

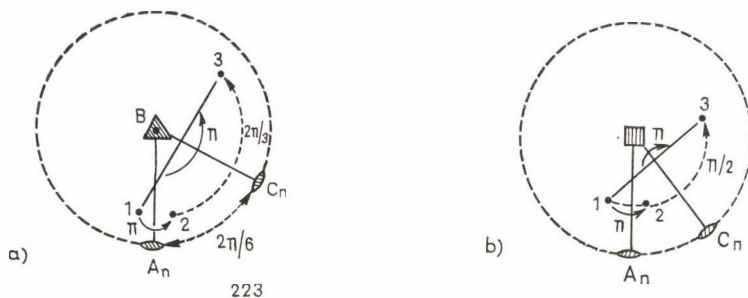
Következésképpen, ha egy két-fogású forgástengelyt egy másik n -fogású forgástengellyel kombinálunk az eredmény egy harmadik két-fogású rotáció:

$$A_\pi \cdot B_\beta = C_\pi. \quad (2.5)$$

Ezt az eredményt másképpen úgy is kifejezhetjük, hogy egy két-fogású és egy n -fogású tengely kombinációja egy két-fogású tengelyt generál.

Ez az eredmény szerkesztéssel szemléltethető (2.7 ábra). Tekintsük példaképpen a 223 és 224 kombinációkat. 2.7a-ban B a papír síkra merőleges három-fogású tengely: $B_{2\pi/3}$, A_π a papír síkjában B -re merőleges két-fogású tengely. Az 1-gyel jelzett helyen levő motívumot A_π körül a papírsík alatt vagy felett π -vel átforgatjuk 2-be, majd a papírsíkban B körül $2\pi/3$ -al 3-ba. Ez ugyanaz, mintha 1-et az ábrán a papírsíkban fekvő C_π tengely körül a papírsík alatt, vagy felett π -vel közvetlenül forgattuk volna 1-ből 3-ba. Tehát $A_\pi \cdot B_{2\pi/3} = C_\pi$.

A 2.7b ábrában B ugyancsak a papírsíkra merőleges négyfogású tengely ($B_{\pi/2}$). A_π merőleges $B_{\pi/2}$ -re és a papír síkjában fekszik. A motívumot ugyanúgy, mint előbb A_π -körül π -vel átforgatjuk 2-be, majd a papír síkjában B körül $\pi/2$ -vel 3-ba. Ez ugyanaz, mintha a motívumot a C_π tengely körül π -vel 1-ből közvetlenül 3-ba forgattuk volna át.



2.7 ábra

A 2.5 egyenletben szereplő két két-fogású A_π és C_π tengelyek közti szög szintén az Euler egyenletből számolható. Legyen ez a szög v , ekkor

$$\cos v = \frac{\cos \beta/2 + \cos \alpha/2 \cos \gamma/2}{\sin \alpha/2 \sin \delta/2} = \frac{\cos \beta/2 + \cos \pi/2 \cos \pi/2}{\sin \pi/2 \sin \pi/2} = \cos \beta/2.$$

Tehát $A_\pi \wedge C_\pi = v = \beta/2$. Másképpen az A_π és C_π közti szög a 222, 223, 224, valamint 226 pontcsoportok esetében a függőleges, A_π és C_π tengelyekre merőleges két-, három-, négy-, illetve hat-fogású tengelyek fogásszámának megfelelő szög fele:

$$\pi/2, \quad 2\pi/6, \quad \pi/4, \quad \pi/6.$$

3. Tükrözés

A tükrözés és rotáció kombinációját tárgyaljuk. A 2.8 ábra két egymással $\alpha/2$ szöget bezáró tükört (m_1 és m_2) tüntet fel. Az 1-ben levő K motívumot az m_1 tükör 2.-ben enantiomorfként X tükrözi. Ezt a tükörképet az m_2 ugyancsak enantiomorfként 3.-ban tükrözi (K).

A tükrözés geometriája miatt az $A-1$ távolság egyenlő az $A-2$ távolsággal és ez egyenlő $A-3$ -mal. Továbbá az ábra szerint

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \quad \text{és} \quad \delta_1 = \delta_2,$$

valamint

$$\varepsilon_2 + \delta_1 = \alpha/2.$$

Mivel $A-1 = A-3$, az 1-ben levő motívumot egy A körüli

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \delta_1 + \delta_2 = 2\varepsilon + 2\delta = \alpha$$

rotáció is leképezheti, azaz két egymással $\alpha/2$ szöget bezáró tükör rotációt generál. A két tükrözés kombinációja rotáció

$$m_1 \cdot m_2 = A_\alpha \quad (2.6)$$

$$(m_1 \wedge m_2 = \alpha/2).$$

Eredményünk kristályok szimmetriájára alkalmazva úgy fogalmazható, hogy két egymással $\alpha/2$ szöget bezáró tükör α -rotációt generál, ahol α értéke

$$\pi, \quad 2\pi/3, \quad \pi/2, \quad 2\pi/6.$$

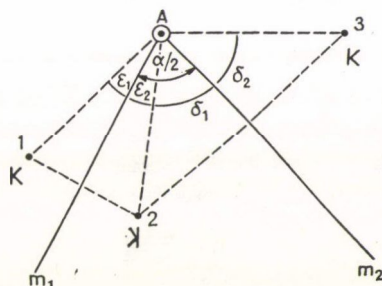
Az ábrából leolvasható, hogy a 2.6 egyenletet más kombinációban is fel lehet írni. Nevezetesen A_α az 1-ben levő motívumot átviszi 3-ba, illetve m_2 a 3.-ban levő motívumot a 2.-be viszi. Ugyanilyen összefüggés áll fenn m_1 -re. Összefoglalva

$$A_\alpha \cdot m_2 = m_{1, \alpha/2} \quad (2.7)$$

$$(m_1 \wedge m_2 = \alpha/2)$$

2.7 így is felírható

$$m_1 \cdot m_2 \cdot A_{-\alpha} = 1 \quad (2.8)$$



2.8 ábra

$(m_1 \wedge m_2 = \alpha/2)$. Az egyenlet jobb oldalán álló 1 itt azt jelenti, hogy az $m_1, m_2, A_{-\alpha}$ kombináció a motívumot eredeti helyén hagyja, tehát nem történt változás. A csoportelméleti kristallográfiában 1-nek ez a jelentése.

Három tükör kombinációja az eddigiekkel azonos meggondolás alapján a következő három egyenlethez vezet:

$$\begin{aligned} m_1 \cdot m_2 \cdot A_{-\alpha} &= 1, \\ m_3 \cdot m_4 \cdot B_{-\beta} &= 1, \\ m_1 \cdot m_4 \cdot C_{-\gamma} &= 1, \end{aligned} \quad (2.9)$$

ahol

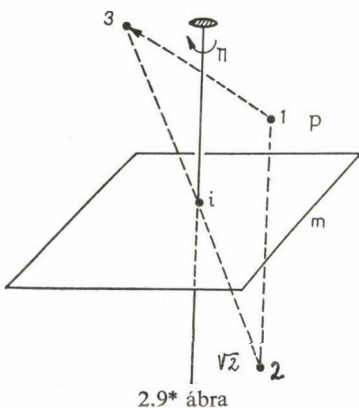
$$\begin{aligned} A_{\alpha} \cdot B_{\beta} &= C_{-\gamma}, \\ A_{\alpha} \cdot B_{\beta} \cdot C_{\gamma} &= 1. \end{aligned} \quad (2.10)$$

4. Tükrözés és inverzió

A tükrözés és inverzió kombinációját a 2.9. ábra szemlélteti.

Az ábrázolt tükör egy inverziós centrumot tartalmaz. Az 1.-ben levő motívum enantimorfját az m tükör leképezi 2.-ben, majd ennek enantimorfját az i inverziós centrum 3.-ba vetíti. Másfelől az A_{π} forgástengely 1-et π rotációval közvetlenül átvizsi 3.-ba. Az egyes lépések a következők:

$$\left. \begin{aligned} 1(K) &\xrightarrow{m} 2(Y) \\ 2(Y) &\xrightarrow{i} 3(K) \end{aligned} \right\} = 1(K) \xrightarrow{A_{\pi}} 3(K).$$



2.9* ábra

Összefoglalva három szimmetriaelem, $A_{\pi}=2$, $\bar{2}$ és $\bar{1}$ három szimmetriaműveletet végez (A_{π} -rotáció: 2; m és i):

$$\begin{aligned} \bar{2} \cdot \bar{1} &= 2, \\ m \cdot i &= 2, \\ m \cdot i \cdot 2 &= 1. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Az A_{π} , m és i műveletek közül bármely kettő kombinációja a harmadikat eredményezi.

3. CSOPORTELMÉLET

1. Bevezetés, definíciók

Csoporton bizonyos objektumoknak, az ún. elemeknek, olyan együttesét (halmazát) értjük, melyeknek a következő axiómákat kell kielégíteniök:

a) a csoportnak tartalmaznia kell egy I egységelemet (identitást), melynek a csoport bármely más elemével képzett szorzata magát az elemet adja. Ha a csoport egy eleme g_i , akkor $I \cdot g_i = g_i$.

b) A csoport bármely két elemének bináris szorzata (kombinációja) beleértve egy elemnek önmagával való kombinációját, szintén eleme a csoportnak. Ha tehát a

csoport két eleme g_i és g_j , akkor $g_i \cdot g_j$, valamint $g_i \cdot g_i = g_i^2$ is eleme a csoportnak: $g_i \cdot g_j = g_k$ és $g_k \in G$, ha $g_i, g_j \in G$ (zárttsági axióma).

c) Az elemek kombinációja asszociatív: $g_i(g_j \cdot g_k) = (g_i \cdot g_j)g_k = g_i \cdot g_j \cdot g_k$. Ha a kombinációk ezenfelül kommutatívak ($g_i \cdot g_j = g_j \cdot g_i$), a csoport Abel-féle csoport.

d) A csoport minden eleméhez tartozik az elem inverze úgy, hogy az elem és inverzének kombinációja az I identitás (egységelem): $g_i \cdot g_i^{-1} = I$.

Egy véges számú csoport *rendje* a csoport elemeinek száma. Ha a csoport elemei ugyanannak az elemnek hatványai

$$\omega^1, \omega^2, \omega^3, \dots$$

és a csoport véges, a csoport *rendje* az a legkisebb hatványkitevő, mely az elemet identitássá teszi. Ugyanazon elem hatványai *ciklust* alkotnak. Bármilyen rotáció ilyen ciklus. Például:

$$\{\omega_{\pi/4}, \omega_{\pi/4}^2, \omega_{\pi/4}^3, \omega_{\pi/4}^4, \omega_{\pi/4}^5, \omega_{\pi/4}^6, \omega_{\pi/4}^7, \omega_{\pi/4}^8 (= I)\}.$$

A csoportalgebrában a hatványozás bináris művelet, jelentése: egymás után következtetés, folytatás. Ezek szerint $\omega_{\pi/4}^2$ jelentése: az objektum elforgatása $\pi/4$ -gyel, majd újbóli elforgatás ugyancsak $\pi/4$ -gyel:

$$(\omega_{\pi/4}^2 = \omega_{\pi/4 + \pi/4} = \omega_{2\pi/4} = \omega_{\pi/2})$$

$\omega_{\pi/4}^7$ azt jelenti, hogy az objektumot (motívumot) egymás után hétszer kell továbbforgatni $\pi/4$ -gyel. Mivel egy teljes körforgás $\omega_{\pi/4}^8$, ezzel elértük a kiinduló pontot, azaz a kiinduláshoz képest nincs változás. Ez az I identitás értelme. Egyszerű geometriai viszonyok között $I = 1$.

Dolgozatunkban a csoportot általában G -vel jelöljük, az elemeket kapcsos zárójel fogja össze. Fenti esetben tehát

$$G = \{I, \omega_{\pi/4}, \omega_{\pi/4}^2, \omega_{\pi/4}^3, \omega_{\pi/4}^4, \omega_{\pi/4}^5, \omega_{\pi/4}^6, \omega_{\pi/4}^7\}.$$

A csoport nyolcad rendű, mivel a legkisebb hatványkitevő, mely identitást eredményez: 8, ($\omega_{\pi/4}^8 = I$). Fenti csoport *gerjesztő eleme* $\omega_{\pi/4}$ a csoportot *gerjesztő reláció*: $\omega_{\pi/4}^8 = I$.

2. Csoportszorzat, részcsoporthok, mellékosztályok

Úgy tűnik, hogy a ciklikus csoportok elvileg végtelenek lehetnek, hiszen akár milyen hatványkitevőig el lehet menni. Könnyen belátható azonban, hogy az identitást előállító hatványkitevőnél magasabb kitevő valamely alacsonyabb kitevőjű elemmel ekvivalens elemet állít elő. Ez az állítás a Cayley-féle szorzótábla segítségével, egyszerű szorzásoknál alkalmazott elrendezésben, megérthető. Tekintsük az alábbi negyed rendű csoport szorzótábláját

$$G = \{\omega_{\pi/2}^4 = (I), \omega_{\pi/2}, \omega_{\pi/2}^2, \omega_{\pi/2}^3\}.$$

A csoport gerjesztő eleme $\omega_{\pi/2}$, a gerjesztő reláció: $\omega_{\pi/2}^4 = I$. A szorzótábla így írható fel:

	I	$\omega_{\pi/2}$	$\omega_{\pi/2}^2$	$\omega_{\pi/2}^3$
I	I	$\omega_{\pi/2}$	$\omega_{\pi/2}^2$	$\omega_{\pi/2}^3$
$\omega_{\pi/2}$	$\omega_{\pi/2}$	$\omega_{\pi/2}^2$	$\omega_{\pi/2}^3$	$\omega_{\pi/2}^4 = I$
$\omega_{\pi/2}^2$	$\omega_{\pi/2}^2$	$\omega_{\pi/2}^3$	$\omega_{\pi/2}^4$	$\omega_{\pi/2}^5 = \omega_{\pi/2}^4 \omega_{\pi/2} = \omega_{\pi/2}$
$\omega_{\pi/2}^3$	$\omega_{\pi/2}^3$	$\omega_{\pi/2}^4 = I$	$\omega_{\pi/2}^5$	$\omega_{\pi/2}^6 = \omega_{\pi/2}^4 \omega_{\pi/2}^2 = \omega_{\pi/2}^2$

Tekintsük további példaképpen a következő számokat: $+1$, -1 , $\sqrt{-1}=i$, $-\sqrt{-1}=-i$. E számok összes lehetséges kombinációi a következők:

$$\begin{array}{c|cccc}
 & 1 & -1 & i & -i \\
 \hline
 1 & 1 & -1 & i & -i \\
 -1 & -1 & 1 & -i & i \\
 i & i & -i & 1 & -1 \\
 -i & -i & i & -1 & 1
 \end{array} \quad (3.1)$$

Fenti táblázatból egyértelműen kitűnik, hogy

1. valamennyi szorzat az eredeti számokat tartalmazza (zártági axióma);
2. bármely elemnek $+1$ -gyel való szorzása az eredeti elemet adja, az identitási axióma tehát teljesül;
3. minden egyes a táblázatban szereplő szám szorozva inverzével eredményül $+1$ -et ad;
4. a műveletek asszociatívok.

Mivel a szorzótáblában szereplő négy szám a csoport axiómáknak megfelel, a számok valódi csoport elemek, azaz

$$G = \{1, -1, i, -i\}.$$

A csoport elemei közül néhány külön csoportokba, az úgynevezett részcsoportokba foglalható össze. A csoportaxiómák a részcsoportokra is érvényesek. Egy csoport részcsoportjainak uniója (\cup), másképpen egyesítése, magát a csoportot állítja elő. Például a 3.1 csoport (H) részcsoportjai:

$H_1 = \{1, -1\}$, $H_2 = \{1, i\}$, $H_3 = \{1, -i\}$, valamint a triviális $H_4 = 1$. A csoport tehát

$$G = H_1 \cup H_2 \cup H_3 \cup H_4.$$

Lagrange tétele értelmében minden csoport rendje bármely részcsoportja rendjének egész számú többszöröse:

$$G/H = N,$$

ahol $N=1, 2, 3, \dots$. Fenti példában G rendje 4, a H_1, H_2, H_3 részcsoportok rendje 2, tehát $N=2$.

Ha néhány egyszerűbb csoport ismert, ezek olyan átfogó csoportokká egyesíthetők, melyeknek az ismert, egyszerűbb csoportok, részcsoportjai. A kristallográfiai pontcsoportok képzésénél éppen így járunk el. Ismert alacsonyabb rendű csoportokból mint részcsoportokból építjük fel a magasabb rendű, bonyolultabb pontcsoportokat.

Izomorfok azok a csoportok, melyek elemei, bár tartalmuk eltérő, formailag azonosak. Az izomorfia két azonos rendű csoport elemeinek és az elemek bináris szorzatainak kölcsönösen egyértelmű megfeleltetése, másképpen leképezése. Leképezésen egy G_1 csoport minden egyes elemének egy másik G_2 csoport minden egyes eleméhez való egyértelmű hozzárendelést értjük. Az izomorfia művelettartó, mert egy G_1 csoport két g_i, g_j elemének szorzata megfelel a G_2 csoport g_{2i}, g_{2j} elemei szorzatának.

Két csoport izomorf, ha szorzótábláik absztrakt értelemben (az elemek geometriai, fizikai, vagy egyéb tartalmának figyelmen kívül hagyásával) azonosak.¹

Egyszerű krisztallográfiai példaképpen tekintsünk mindenekelőtt egy két elemből (I és g) álló absztrakt csoportot. A csoport szorzótáblája:

$$\begin{array}{c} I \quad g \\ I \left| \begin{array}{cc} I & g \\ g & I \end{array} \right. \end{array}$$

Ez a csoport izomorf az $\{1, 2\}$, $\{1, i\}$ és $\{1, m\}$ krisztallográfiai csoportokkal ($2 = A_\pi$, két fogású rotáció; $i =$ inverzió, $m =$ tükrözés), mivel szorzótábláik az absztrakt csoport szorzótábláival ekvivalensek:

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ 1 \left| \begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{array} \right. \\ 2 \end{array} & \begin{array}{c} 1 \quad i \\ 1 \left| \begin{array}{cc} 1 & i \\ i & 1 \end{array} \right. \\ i \end{array} & \begin{array}{c} 1 \quad m \\ 1 \left| \begin{array}{cc} 1 & m \\ m & 1 \end{array} \right. \\ m \end{array} \\ \{1, 2\} & \{1, i\} & \{1, m\} \end{array}$$

Minden csoportban egy adott elem csak egyszer fordul elő, míg a szorzótáblákban ugyanaz az elem kétszer, bonyolultabb esetben többször is szerepelhet. Az absztrakt I identitásnak a fenti krisztallográfiai csoportokban 1 , az absztrakt csoport g elemének 2 , $i = \bar{1}$, illetve $\bar{2} = m$ felelnek meg.

Egy krisztallográfiai szimmetria csoport kezelését gyakran leegyszerűsíti, ha egy absztrakt csoporttal, vagy egy már ismert másik krisztallográfiai csoporttal való izomorfiaja kimutatható.

Mellékosztályon részcsoport elemeinek egy a részcsoporthoz nem tartozó elemmel, illetve elemekkel való szorzatát értjük. Így például egy $H = 1, a, b$ részcsoportnak a hozzátartozó G csoport egy x elemével való jobb-, illetve baloldali szorzata a következő mellékosztályokat szolgáltatja:

- a) baloldali: $x \cdot H = x \cdot 1, x \cdot a, x \cdot b$,
b) jobboldali: $H \cdot x = 1 \cdot x, a \cdot x, b \cdot x$.

A jobb- és baloldali mellékosztályok általában nem kommutatívok, azaz $x \cdot H \neq H \cdot x$. A krisztallográfiai pontcsoportok esetében azonban kommutálnak. A részcsoporthoz nem tartozó és a mellékosztályt generáló elem neve *reprezentáns*.

¹ L. 1. sz. függelék.

A mellékosztályok segítségével egy csoport valamelyik részcsoporthából előállítható. Legyen egy részcsoporth

$$H = \{1, a, b, c\}$$

és legyenek a reprezentánsok $1, x, y, z$. A reprezentánsok között az identitásnak elő kell fordulnia, mert a reprezentánsok annak a G csoportnak elemei, melynek H egy részcsoporthja. A H -val képzett baloldali mellékosztályok a következők:

$$\begin{array}{cccc} 1 \cdot 1 & 1 \cdot a & 1 \cdot b & 1 \cdot c \\ x & x \cdot a & x \cdot b & x \cdot c \\ y & y \cdot a & y \cdot b & y \cdot c \\ z & z \cdot a & z \cdot b & z \cdot c \end{array}$$

A mellékosztályok összessége tehát az a G csoport, melynek H egy részcsoporthja:

$$G = \{1, a, b, c, x, y, z, xa, xb, xc, ya, yb, yc, za, zb, zc\}$$

G 16-od rendű csoport, amely a 4-ed rendű H részcsoporthal kielégíti a Lagrange tételt:

$$G/H = 16/4 = 4^2.$$

Ha H egy G csoport részcsoporthja és $g_i \cdot H$ egy mellékosztály g_i reprezentánsokkal, akkor a G csoportot a

$$H \cup g_i \cdot H = G \quad (3.2)$$

($g_i = 1, g_1, g_2, g_3, \dots$) mellékosztályok állítják elő.

3. Krisztallográfiai csoportok

A krisztallográfiai csoportok elemei szimmetria műveletek. Valamilyen krisztallográfiai művelethalmaz csoportmivoltát a csoport axiómák érvényesülése dönti el. Például egy hatfogású tengely szimmetria műveletei $2\pi/6$ rotációk. Ez a Schoenflies-féle jelölés szerint a C_6 pontcsoport. Az egytengelyű rotációs műveletek *gerjesztő* eleme $A_{2\pi/n}$ (a hatfogású tengelynél tehát $n=6$ miatt $A_{2\pi/6}$) és gerjesztő relációja az egységet előállító hatványkitevő: $A_{2\pi/n}^n = 1$ (a hatfogású tengelynél $A_{2\pi/6}^6 = A_{12\pi/6} = A_{2\pi} = 1$.) A hatfogású csoport tehát:

$$G = \{6\} = \{1, A, A_\alpha^2, A_\alpha^3, A_\alpha^4, A_\alpha^5\},$$

ahol $\alpha = A_{2\pi/6}$. A krisztallográfiai rotációs pontcsoportokat a csoport elemeinek hatványkitevői generálják olyan értelemben, hogy a fogás-számnak megfelelő rotációs műveleteket össze kell adni, azaz

$$A_{2\pi/6}^2 = A_{2\pi/6 + 2\pi/6}, A_\alpha^3 = A_{2\pi/6 + 2\pi/6 + 2\pi/6} = A_\pi \quad \text{s.i.t.}$$

A krisztallográfiai csoportok szimmetria-műveleteit szimmetria elemek kombinációi állítják elő. A kombinációkat szorzatként írjuk fel, a szorzás itt annyit jelent, hogy a felírás rendjében egymásután következő szimmetria műveleteket kell elvé-

² Lagrange tétele az absztrakt algebra jelölésével így írható: $G(\text{mod } H)$, maradék: 0.

gezni. Röviden összefoglalva *a*) a rotációs pontcsoportokat hatványok, *b*) a többi pontcsoportot elemek kombinációja állítja elő.

Tekintsük példaképpen az orthogonális x_1, x_2, x_3 koordináta-rendszert, mellyel sorban a következő műveleteket végezzük el (3.1 ábra): π rotáció (2) az x_3 tengely körül, inverzió ($\bar{1}=i$) az origón mint szimmetriacentrumon keresztül és tükrözés ($\bar{2}=m$) az x_1x_2 síkban. A koordináta-rendszer mátrix alakja:

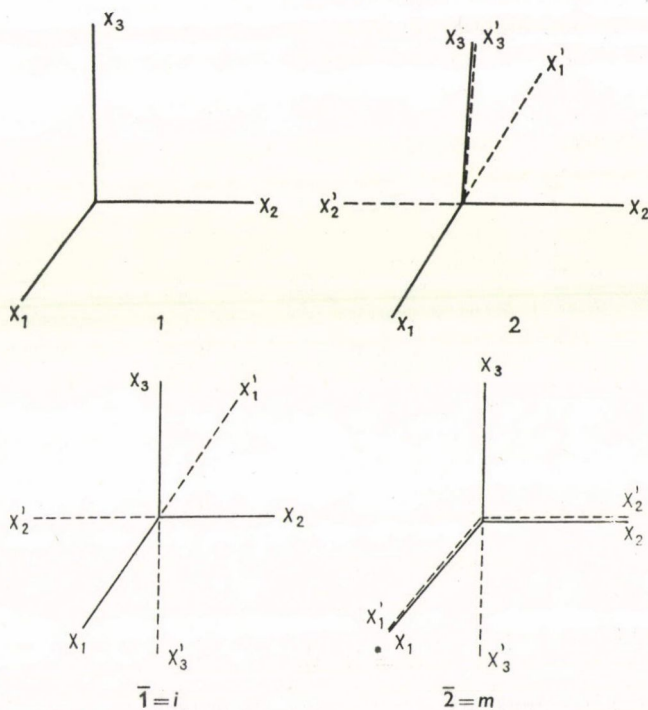
$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Az egyes műveletek az egység mátrixot a következőképpen módosítják

$$2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} \quad \bar{1} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = i, \quad \bar{2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = m.$$

Ha $\bar{1}$ és 2-őt a mátrix szorzat szabályai szerint szorozzuk, az eredmény

$$\bar{1} \cdot 2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & +1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \bar{2} = m.$$



3.1 ábra

A három mátrix kombinációja viszont az identitást (esetünkben az egység mátrixot) adja. Így a következő csoporthoz jutunk:

$$G = \{1, 2, \bar{1}, \bar{2}\} = \{1, 2, i, m\}.$$

A három szimmetriaművelet $(2, i, m)$ kombinációja az alábbi szorzótáblába foglalható össze:

$$\begin{array}{c|ccc} & 2 & \bar{1} & m \\ \hline 2 & 1 & \bar{2} & \bar{1} \\ \bar{1} & \bar{2} & 1 & 2 \\ m & \bar{1} & 2 & 1 \end{array} = \{1 \cdot 2, \bar{1} = i, \bar{2} = m\}.$$

Ez valódi csoport, mivel kielégíti a csoport axiómákat: van egységeleme, bármely két elem szorzata szintén eleme a csoportnak ($1 \cdot 1 = 1$, $2 \cdot m = i$ s. i. t.), végül a műveletek asszociatívak.

Később látni fogjuk, hogy ez a $2/m$ pontcsoport (Schoenflies jelölése C_{2h}). A csoportnak négy eleme van, rendje tehát 4. A részcsoportok:

$$H_1 = \{1\}, \quad H_2 = \{1, 2\}, \quad H_3 = \{1, i\} \quad \text{és} \quad H_4 = \{1, m\}.$$

A G csoport rendje a H_1 részcsoport rendjének négyszerese, a többinek kétszerese. Lagrange tétele tehát érvényesül.

Az egyes kristallográfiai pontcsoportokat alacsonyabb rendű csoportok egyesítéséből (\cup uniójából) állítjuk elő közvetlenül vagy mellékosztályképzéssel, azaz néhány elemi (egy tengelyű rotációs, másképpen ciklikus) csoportból kiindulva a csoportelméleti összefüggések segítségével építjük fel. Ehhez mindenekelőtt definiáljuk egy *részcsoporthoz indexének* fogalmát. A mellékosztály képzésnél egy csoport részcsoportjának minden elemét megszorozzuk egy a részcsoportban nem tartozó elemmel. A részcsoport indexén azoknak a részcsoportban nem tartozó elemeknek (reprezentánsoknak) számát értjük, melyeket a mellékosztályképzésnél felhasználtunk.

Legyenek egy H részcsoport elemei: $h_1 = I, h_2, h_3, \dots, h_s$, reprezentánsok pedig $g_1 = I, g_2, g_3, \dots, g_r$. Ekkor a mellékosztályok összessége az alábbi csoportot alkotja ($h_1 = g_1 = I$):

$$\begin{array}{l} I, \quad h_2, \quad h_3, \quad h_4, \quad \dots, \quad h_s \\ g_2, g_2 h_2, g_2 h_3, g_2 h_4, \dots, g_2 h_s \\ g_3, g_3 h_2, g_3 h_3, g_3 h_4, \dots, g_3 h_s \\ \vdots \\ g_r, g_r h_2, g_r h_3, g_r h_4, \dots, g_r h_s \end{array} \quad (3.3)$$

A H részcsoport s rendű (s eleme van), a reprezentánsok száma r , a részcsoportindexe tehát r .

Így például a $2/m$ (C_{2h}) pontcsoport

$$G = \{1, 2, i, m\}.$$

G egyik részcsoportja

$$H = \{1, 2\}.$$

A mellékosztályt megkapjuk, ha H elemeit G azon elemeivel szorozzuk, melyek nem elemei H -nak, tehát i -vel és m -mel. Ezért a H részcsoport indexe 2. Ugyanígy $H_2 =$

$= \{1, i\}$, a belőle képzett mellékosztályok $2 \cdot 1, 2 \cdot i$; $H_3 = \{1, m\}$, a belőle képzett mellékosztályok $2 \cdot 1, 2 \cdot m$.

4. Transzformáció, konjugált csoportok³

Az Abel-féle csoportok kommutatívok

$$G_1 \cdot G_2 = G_2 \cdot G_1.$$

Mindkét oldalt G_2^{-1} -el szorozva

$$G_2^{-1} \cdot G_1 \cdot G_2 = G_2^{-1} \cdot G_2 \cdot G_1.$$

Mivel $G_2^{-1} \cdot G_2 = 1$

$$G_2^{-1} \cdot G_1 \cdot G_2 = G_1.$$

Ugyanígy G_2 -re

$$G_1^{-1} \cdot G_2 \cdot G_1 = G_2.$$

A $G_1^{-1}(\)G_1$ transzformációs operátor, amely egy Abel-féle csoportot, illetve e csoport valamennyi elemét önmagába transzformálja.

Minden hatványművelet a műveletet önmagába transzformálja.

Ennek bizonyítására tekintsünk egy ciklikus ω^1 műveletet, melynek transzformációs operátora a fentiek szerint

$$\omega^{-n}(\)\omega^n. \quad (3.4)$$

Az operátort alkalmazva a következő eredményt kapjuk:

$$\omega^{-n}\omega^1\omega^n = \omega^{-n+1+n} = \omega^1.$$

Minden ciklikus csoport Abel-féle csoport, másképpen valamennyi ugyanazon tengely körüli rotáció, mivel ciklikus, Abel-féle csoport. (A Schoenflies jelölés innen ered; C_n = ciklikus csoport n -fogásszámú tengely körül.)

Ha valamely G csoport egy g_i eleme egy b elemet c -vé transzformál, azaz

$$g_i^{-1} \cdot b \cdot g_i = c$$

c konjugáltja b -nek.

Önkonjugált, vagy másképpen *invariáns* egy elem, ha a csoport összes többi eleme ezt az elemet önmagába transzformálja. Továbbá, ha egy G csoport valamennyi eleme a csoport H részcsoportját önmagába transzformálja, a részcsoport *invariáns*, ebben az esetben

$$H \cdot g_i = g_i \cdot H,$$

ahol g_i eleme G -nek, de nem eleme H -nak.

A részcsoport invarianciáját a következő egyenlet fejezi ki:

$$g_i^{-1} \cdot H \cdot g_i = H.$$

Minden 2-es indexű részcsoport invariáns, ezért a bal- és jobboldali mellékosztályai felcserélhetők.

A mellékosztályokból felépített csoport tehát

$$G = H, \cup g_i H$$

vagy

$$G = H, H g_i$$

³ 2. sz. függelék.

(ahol g_i a mellékosztályok valamennyi reprezentánsa, azaz valamennyi g_i eleme G -nek, de nem eleme H -nak).

Az elmondottak alapján valamennyi ciklikus pontcsoport, továbbá a 2-es indexű részcsoporthokból előállított csoportok invariánsak.

5. Első- és másodfajú szimmetriaműveletek

Az egyszerű rotációk elsőfajú, az inverzióval, vagy tükrözéssel kombinált rotációk másodfajú műveletek. Két másodfajú szimmetriaművelet kombinációja elsőfajú műveletet generál

$$A_\alpha \cdot i \cdot B_\beta \cdot i = A_\alpha \cdot B_\beta \cdot i^2 = A_\alpha B_\beta \quad (3.5)$$

mivel $i^2 = 1$. Ugyanígy

$$A_\alpha \cdot m \cdot B_\beta \cdot m = A_\alpha \cdot B_\beta \cdot m^2 = A_\alpha \cdot B_\beta \quad (3.6)$$

és

$$A_\alpha \cdot m \cdot B_\beta \cdot i = A_\alpha \cdot B_\beta \cdot m \cdot i = A_\alpha \cdot B_\beta \cdot C_\pi \quad (3.7)$$

mivel $m \cdot i = C_\pi = 2$.

A 3.5, 3.6 és 3.7 egyenletekből következik, hogy minden másodfajú szimmetriaműveletet tartalmazó csoportnak csak elsőfajú elemekből álló részcsoporthja is van.

Az elsőfajú elemeket tartalmazó ilyen részcsoporthok indexe mindig 2. Ez másképpen azt jelenti, hogy minden másodfajú műveleteket is tartalmazó csoportban egyetlen számú első és másodfajú elem van. Végül, mint erről már szó esett, az elsőfajú elemeket tartalmazó 2-es indexű részcsoporthok csoporttranszformációra invariánsak.

A krisztallográfiai pontcsoportok egy jelentős része a 3.2 egyenlet felhasználásával mellékosztályképzéssel generálható. A 3.2 csoport g reprezentánsai elsőfajú szimmetria műveletek. A másodfajú \bar{g} reprezentánsok a 3.2-vel izomorf csoportot képeznek. A g és \bar{g} reprezentánsok ugyanis ezekben a csoportokban első- vagy másodfajú rotációk, az izomorfia ennek következménye.

Ha a rotációs fogás-szám páros, g és \bar{g} rendje azonos (ez a részcsoporthok 2-es indexéből következik). A páratlan számú ($n=3$) tengely-fogás \bar{g} rendje, mint később látni fogjuk, nem 3, hanem 6. Ezért a háromfogású szimmetriaműveletből mellékosztályképzéssel pontcsoport nem generálható. Izomorfia ugyanis csak azonos rendű csoportok között lehetséges.

Összefoglalva, minden elsőfajú G csoportnak, amely 2-es indexű páros rendű H részcsoporthok és g -vel képzett mellékosztályok egyesítésével állítható elő, az izomorfia miatt megfelel egy olyan másodfajú \bar{G} csoport, melyet ugyancsak 2-es indexű, páros rendű H részcsoporthok és ezeknek a részcsoporthoknak \bar{g} -vel képzett mellékosztályainak uniójával generálható.

Mivel ez az eljárás $n=3$ fogás-számú tengelyekre nem alkalmazható, ennél a pontcsoport-generáló módszernél csak az alábbi első- és másodfajú elemek jöhetnek tekintetbe:

$$2, \bar{2} = m, 4, \bar{4}, 6 \quad \text{és} \quad \bar{6}.$$

A mellékosztályképzéssel előállított csoportok generálásához az inverzióra, mint részcsoporthra ($\{i\} = \{1, \bar{1}\}$) nincs szükség. Ez a részcsoporth a mellékosztályképzéssel elő nem állítható pontcsoportok generálásánál szerepel.

4. KRISZTALLOGRÁFIAI PONTCSOPORTOK

Az eddigiekből nyilvánvaló, hogy, ha néhány egyszerű krisztallográfiai pontcsoport ismert, ezekből olyan bonyolult, magasabbrendű csoportok építhetők fel, melyeknek az ismert, kiinduló csoportok részcsoportjai. Az egyszerű ciklikus szimmetriacsoportokkal (C_n , 2.5 ábra) lehet kezdeni, mivel minden kristály egyetlen tengely körüli rotációval ötféle forgási szimmetria valamelyikét valósítja meg. Ebből az öt ciklikus szimmetriaműveletből állítjuk elő a pontcsoportokat. Az egyes ciklikus csoportok gerjesztő elemei és gerjesztő relációi a következők:

Tengely fogásszám, n	Gerjesztő elem	Gerjesztő reláció
1	$A_{2\pi}$	$A_{2\pi}^1 = 1$
2	A_{π}	$A_{\pi}^2 = 1$
3	$A_{2\pi/3}$	$A_{2\pi/3}^3 = 1$
4	$A_{\pi/2}$	$A_{\pi/2}^4 = 1$
6	$A_{2\pi/6}$	$A_{2\pi/6}^6 = 1$

Az egyes pontcsoportoknak kisebb rendű csoportokból való előállításának feltétele, hogy egy-egy szimmetriaművelet legalább egy másik műveletet önmagába transzformáljon és a kiinduló csoportból előállított pontcsoport műveleteire a kristálystruktúra invariáns legyen. Például a 223 pontcsoport 3-fogású tengelyének műveletei invariánsak a 2-fogású tengelyek műveleteire. Ez fordítva nem áll, mivel, mint alább kitűnik, a 3-fogású tengely műveletei a 2-fogású tengelyeket felcserélik.

1. Egyetlen tengely körüli (monoaxiális) rotációs műveletek (2.5a ábra)

$C_1, n=1$. Ebben a triviális esetben a gerjesztő elem $A_{2\pi}$, a gerjesztő reláció $A_{2\pi}^1 = 1$. A csoportnak egyetlen eleme és egyetlen részcsoportja $\{1\}$ maga a csoport.

$C_2, n=2$. A gerjesztő elem A_{π} , a gerjesztő reláció $A_{\pi}^2 = 1$. Innen a csoport

$$G_2 = \{2\} = \{1, A_{\pi}\} = \{1, 2\}.$$

Az egyetlen részcsoport $H = \{1\}$.

$C_3, n=3$. A gerjesztő elem $A_{2\pi/3}$, a gerjesztő reláció $A_{2\pi/3}^3 = 1$. A csoport

$$G_3 = \{3\} = \{1, A_{2\pi/3}, A_{2\pi/3}^2\}.$$

Részcsoportok:

$${}^1H_3 = \{1\}, \quad {}^2H_3 = \{3\}.$$

$C_4, n=4$. A gerjesztő elem: $A_{\pi/2}$, a gerjesztő reláció $A_{\pi/2}^4 = 1$

$$G_4 = \{4\} = \{1, A_{\pi/2}, A_{\pi/2}^2, A_{\pi/2}^3\}.$$

A részcsoportok

$${}^1H_4 = \{1\}, \quad {}^2H_4 = \{1, A_{\pi/2}^2\} = \{1, A_{\pi}\} = \{1, 2\} = \{2\}.$$

$C_6, n=6$. A gerjesztő elem $A_{2\pi/6}$, a gerjesztő reláció $A_{2\pi/6}^6 = 1$

$$G_6 = \{6\} = \{1, A_{2\pi/6}, A_{2\pi/6}^2, A_{2\pi/6}^3, A_{2\pi/6}^4, A_{2\pi/6}^5\}.$$

Részcsoportok:

$${}^1H_6 = \{1\}, {}^2H_6 = \{1, A_{2\pi/6}^3\} = \{1, A_\pi\} = \{1, 2\} = \{2\},$$

$${}^3H_6 = \{1, A_{2\pi/6}^2, A_{2\pi/6}^4\} = \{1, A_{2\pi/3}, A_{2\pi/3}^2\} = \{3\}.$$

Könnyen ellenőrizhető, hogy a ciklikus csoportokra a csoportaxiómák érvényesek. Minden csoportnak van egységeleme (a gerjesztő reláció), valamennyi csoport két elemének szorzata maga is csoportelem (például a G_6 csoport két eleme és szorzatuk):

$$A_{2\pi/6}^3 \cdot A_{2\pi/6}^4 = A_{2\pi/6}^7 = A_{2\pi/6}^6 \cdot A_{2\pi/6} = A_{2\pi/6} (A_{2\pi/6}^6 = 1).$$

Végül bármely elem és inverzének szorzata 1, a műveletek asszociatívak.

A ciklikus részcsoportokat így állítjuk elő (ha a csoport ismert). Generáljon egy elsőfajú csoportot egy A_α rotáció, ennek egy részcsoportja $A_\alpha^p = A_{p\alpha}$. Másfelől $\alpha = 2\pi/n$, $p\alpha = 2\pi/(n/p)$. Ez annyit jelent, hogy, ha $\{n\}$ egy csoport és p egész számok, az n részcsoportjai előállíthatók, ha felírjuk mindazokat az egész számokat, melyeket az (n/p) hányados szolgáltat. Eszerint $\{1\}$ részcsoportja $\{2\}$ -nek, a $\{3\}$ részcsoportjai $\{1\}$ és $\{3\}$, a $\{4\}$ részcsoportjai $\{1\}$, $\{2\}$ és $\{4\}$. Végül a $\{6\}$ részcsoportjai $\{1\}$, $\{2\}$ (mivel $6/3=2$), $\{3\}=(6/2)=3$ és $\{6\}$.

2. Egyetlen tengely körüli rotoinverziós csoportok (2.5.b ábra)

A rotoinverzió két műveletnek, egy rotációnak és egy inverzióknak a kombinációja. Ez másképpen az elsőfajú rotációs csoportok elemeinek az i inverzióval való bináris szorzatát jelenti (rotáció, majd utána inverzió): $(A_{xi})^n$, ahol az n hatványkitevő egész számok egymásutánja. A Schoenflies jelölésben a rotoinverzió C_{ni} ($n=1, 2, 3, 4, 6$). Vizsgáljuk meg tengely-fogásszámok szerint az egyes rotoinverziós csoportokat.

$$\underline{C_{1i}, n = 1.}$$

$$C_{1i}, \bar{G}_1 = \{1, A_{2\pi} \cdot i\} = \{1, i\} = \{1, \bar{1}\} = \{\bar{1}\}.$$

Ez egy két elemből álló másodrendű csoport.

$$\underline{C_{2i}, n = 2.}$$

$$\bar{G}_2 = \{A_\pi \cdot i, A_\pi^2, i^2\} = \{1, A_\pi \cdot i\} = \{1, \bar{2}\} = \{1, m\} = \{\bar{2}\}.$$

$$\underline{C_{3i}, n = 3.}$$

Ez a csoport nem lehet harmadrendű, mint elsőfajú C_3 megfelelője. Ennek az az oka, hogy a csoportelméleti identitási axióma miatt a motívumnak a szimmetriaművelet befejezése után eredeti helyére kongruens állapotban kell visszakérülnie. Háromfogású rotációnál, ha a rotáció másodfajú ($\bar{3}$), a motívum csak 6 forgás után kerülhet ilyen helyzetbe. Ez könnyen belátható. Legyen a motívum K . A C_{3i} szimmetriaművelet a következőket írja elő:

Elfordulási szög:

A motívum alakja:

0	K
$2\pi/3$	X
$2(2\pi/3)$	K
$3(2\pi/3) = 2\pi$	X
$4(2\pi/3)$	K
$5(2\pi/3)$	X
$6(2\pi/3) = 4\pi$	K

A K-val ábrázolt motívum csak ismételt (kétszeri 2π) rotáció után lesz eredeti helyén kongruens. A C_{i3} pontcsoport tehát

$$\bar{G}_3 = \{(A_{2\pi/3} \cdot i), (A_{2\pi/3} \cdot i)^2, (A_{2\pi/3} \cdot i)^3, (A_{2\pi/3} \cdot i)^4, (A_{2\pi/3} \cdot i)^5, (A_{2\pi/3} \cdot i)^6\} = \{\bar{3}\}.$$

Mivel $i^2=1$, a páros hatványkitevőjű inverziók értéke 1 (nincs inverzió). Az identitási axiómának a

$$(A_{2\pi/3} \cdot i)^6 = 1$$

reláció tesz eleget. A csoportot ezek után így írhatjuk fel:

$$\bar{G}_3 = \{1, A_{2\pi/3} \cdot i, A_{2\pi/3}^2 \cdot i, A_{2\pi/3}^3 \cdot i, A_{2\pi/3}^4 \cdot i, A_{2\pi/3}^5 \cdot i\} = \{\bar{3}\}.$$

2π periódusú rotációról lévén szó

$$A_{2\pi/3}^4 = A_{2\pi/3}^3 \cdot A_{2\pi/3} = A_{2\pi/3} \quad (\text{mivel } A_{2\pi/3}^3 = 1).$$

Ezért

$$\bar{G}_3 = \{1, A_{2\pi/3} \cdot i, A_{2\pi/3}^2 \cdot i, i, A_{2\pi/3} \cdot i, A_{2\pi/3}^2 \cdot i\}.$$

Nem tekintve a triviális $\{1\}$ -et, ez a csoport két részcsoportha bontható

$${}^1H_3 = \{1, A_{2\pi/3}\}, \quad {}^2H_3 = \{1, i\}.$$

A két csoport szorzótáblája:

$$\begin{array}{c|cc} & 1 & A_{2\pi/3} & A_{2\pi/3}^2 \\ \hline 1 & 1 & A_{2\pi/3} & A_{2\pi/3}^2 \\ i & i & A_{2\pi/3} \cdot i & A_{2\pi/3}^2 \cdot i \end{array}$$

A szorzótábla második sora a $\{G_3\}=\{3\}$ csoportnak i szerinti mellékosztálya:

$$i, A_{2\pi/3} \cdot i, A_{2\pi/3}^2 \cdot i$$

$$\underline{C_{4i}, n=4.}$$

$$\begin{aligned} \bar{G}_4 &= \{(A_{\pi/2} \cdot i), (A_{\pi/2} \cdot i)^2, (A_{\pi/2} \cdot i)^3, (A_{\pi/2} \cdot i)^4\} = \\ &= \{1, A_{\pi/2} \cdot i, A_{\pi/2}^2 \cdot i, A_{\pi/2}^3 \cdot i\} = \{\bar{4}\}. \end{aligned}$$

Az egyetlen részcsoportha: $H_4 = \{1, A_{\pi/2}^2\} = \{1, 2\} = \{2\}$, mivel $A_{\pi/2}^4 \cdot i^4 = 1$.

$$\underline{C_{6i}, n=6.}$$

$$\bar{G} = \{(A_{2\pi/6} \cdot i), (A_{2\pi/6} \cdot i)^2, (A_{2\pi/6} \cdot i)^3, (A_{2\pi/6} \cdot i)^4, (A_{2\pi/6} \cdot i)^5, (A_{2\pi/6} \cdot i)^6\}.$$

Az egyes elemek a következőképpen bonthatók fel:

$$A_{2\pi/6} = A_{2\pi/6}^{-2} \cdot A_{2\pi/6}^3$$

$$A_{2\pi/6}^2 \cdot i^2 = A_{2\pi/6}^2$$

$$A_{2\pi/6} \cdot i = A_{2\pi/6}^4 \cdot A_{\pi} \cdot i = A_{2\pi/6}^4 m$$

$$A_{2\pi/6}^3 \cdot i = A_{\pi} \cdot i^2 \cdot i = A_{\pi} \cdot i = m$$

$$A_{2\pi/6}^4 \cdot i^4 = A_{2\pi/6}^4$$

$$A_{2\pi/6}^5 \cdot i^5 = A_{2\pi/6}^2 \cdot A_{\pi/6}^3 \cdot i^4 i = A_{2\pi/6}^2 \cdot A_{\pi} \cdot i = A_{2\pi/6}^2 \cdot m.$$

Behelyettesítve:

$$\bar{G}_6 = \{1, A_{2\pi/6}^2 \cdot m, A_{2\pi/6}^4 \cdot m, m, A_{2\pi/6}^2, A_{2\pi/6}^4\} = \{\bar{6}\}$$

m -szerint rendezve:

$$\{\bar{6}\} = \begin{Bmatrix} 1 & A_{2\pi/6}^2 & A_{2\pi/6}^4 \\ m & A_{2\pi/6}^2 \cdot m & A_{2\pi/6}^4 \cdot m \end{Bmatrix}. \quad (4.1)$$

Ez az elrendezés $\{\bar{6}\}$ két csoportjának szorzata, az egyik

$$G_3 = \{3\} = \{1, A_{2\pi/6}^2, A_{2\pi/6}^4\} = \{1, A_{2\pi/3}, A_{2\pi/3}^2\},$$

a másik

$$\bar{G}_2 = \{\bar{2}\} = \{1, m\}.$$

A $\{\bar{6}\}$ csoport mindkét részcsoportha kielégíti a Lagrange feltételeit:

$$\{\bar{6}\} \pmod{3}: 2$$

és

$$\{\bar{6}\} \pmod{2}: 3,$$

maradéktag 0.

A 4.1 csoport második sora a $\{3\}$ részcsoportha m -szerinti mellékosztálya:

$$m, A_{2\pi/3} \cdot m, A_{2\pi/3}^2 \cdot m.$$

A másodfajú egyetlen tengely körüli rotációk részcsoporthai ugyanúgy állíthatók elő, mint az elsőfajú rotációké. Most a másodfajú generáló elem

$$(A_{\alpha} \cdot i)^p$$

a csoport elemeit a p hatványkitevő állítja elő.

Ha p páros, $i^2=1$. Ebben az esetben a részcsoportha elsőfajú rotációs csoport. Másfelől egy másodfajú rotációs csoport rendje, mint láttuk páros (2, 4, 6), p páros esetben mindig van legalább egy elsőfajú rotációs csoport.

Ha p páratlan, a hatványkitevő alternáló első- és másodfajú részcsoporthokra bontható fel. Mivel a csoport rendje páros és a csoport rendjének p -vel képzett hányadosa páratlan, a részcsoporthok egyenlő számú másod- és elsőfajú rotációs csoportok. Ennek megfelelően $\{1\}$ részcsoportha $\{1\}$ és $\{1\}$; $\{2\}$ részcsoporthai $\{1\}$ és $\{2\}$; 3 részcsoporthai $\{1\}$, $\{3\}$, $\{1\}$ és $\{3\}$. 6 részcsoporthai $\{1\}$, $\{3\}$, $\{2\}$ és $\{6\}$. Négyfajú másodfajú csoportoknak csak két elsőfajú részcsoportha lehet: $\{1\}$ és $\{2\}$. Az egyetlen másodfajú részcsoportha a triviális $\{4\}$.

Az egyetlen tengely körül forgó rotációs és rotoinverziós csoportok ciklikusak. Ezért a 3.4 összefüggés miatt ezek a csoportok és részcsoporthaik szimmetriaműveletekre invariánsak.

3. Több tengely körüli (heteroaxiális) csoportok

A 2. kristálygeometriai fejezetben foglaltak szerint három, egymást egy pontban metsző forgástengely kombinációk csak a tengelyek krisztallográfaiak lehetséges fogásszám korlátai között fordulhatnak elő. Ezek a (dihedrális) csoportok: kétfogású tengelyek merőlegesek két-, három-, négy- és hatfogású tengelyekre. Így ezek a pontcsoportok két- és többfogású rotációk kombinációjával állíthatók elő. Csoportkombinációk (szorzatok) képezhetők, ha az egyik csoport minden eleme a másik csoportot önmagába transzformálja. Egy n -fogású tengelyre merőleges egy vagy két kétfogású tengely ennek a feltételnek eleget tesz. Ezért az egymást egy pontban metsző n -fogású tengelyek körüli rotációk $\{2\}$ és $\{n\}$ csoportjai magasabbrendű (dihedrális) csoportokká kombinálhatók. A 2. fejezetben kifejtettek szerint ugyanis a kétfogású tengelyek merőlegesek az n -fogású tengelyekre. A dihedrális pontcsoportokat tehát a 2 és n fogású tengelyek kombinációja állítja elő:

$$G_2 \cdot G_1 = \{2\} \{1\} \quad D_1 \equiv C_2$$

$$G_2 \cdot G_2 = \{2\}_1 \{2\}_2 \quad D_2$$

$$G_2 \cdot G_3 = \{2\} \{3\} \quad D_3$$

$$G_2 \cdot G_4 = \{2\} \{4\} \quad D_4$$

$$G_2 \cdot G_6 = \{2\} \{6\} \quad D_6$$

Valamennyi esetben a $\{2\}$ és $\{n\}$ csoportok kombinációit generáljuk, azaz a

$$\{2\}_1 = \{1, A_\pi\}$$

csoportot kombináljuk az alábbi csoportokkal:

$$\{2\}_2 = \{1, B_\pi\}$$

$$\{3\} = \{1, B_{2\pi/3}, B_{2\pi/3}^2\}$$

$$\{4\} = \{1, B_{\pi/2}, B_{\pi/2}^2, B_{\pi/2}^3\}$$

$$\{6\} = \{1, B_{2\pi/6}, B_{2\pi/6}^2, B_{2\pi/6}^3, B_{2\pi/6}^4, B_{2\pi/6}^5\}.$$

Az ebben a fejezetben tárgyalt elsőfajú és belőlük az izomorfia alapján levezetett másodfajú csoportokat a 3. fejezetben ismertetett

1. egyesítéssel (\cup), illetve
2. mellékosztályképzéssel

állítjuk elő.

A mellékosztályképzés során a 3.3 pontban tárgyalt 2-es indexű csoportokat a $\{2\}$, $\{3\}$, $\{4\}$ és $\{6\}$ csoportok elemeivel bővítjük. A pontcsoport előállítás sémája tehát ebben az esetben

$$G = H \cup g_j H$$

vagy egyszerűen

$$G = H, g_j H,$$

ahol H a 2-es indexű részcsoporthoz és g_j rotációs csoportbeli reprezentánsok. Ha a g_j reprezentánsok rotoinverziós elemek (\bar{g}_j), melyek forgástengelye a rotációs elemek (g_j) forgástengelyével azonos, akkor a \bar{g}_j reprezentánsokkal képzett mellékosztályokból álló csoport izomorf a \bar{g}_j reprezentánsokkal előállított csoporttal

$$H \cup g_j H \xrightarrow{\text{izomorf}} H \cup \bar{g}_j H.$$

Ily módon rotációs csoportokból, mint részcsoporthoz bonyolultabb magasabbrendű első- és másodfajú csoportok generálhatók (4.1 ábra). A következő csoportokat kapjuk.

$$D_2, \{2\}_1, \{2\}_2 \text{ (2.6 ábra).}$$

Ezt a két csoportot részcsoporthoz tekintve egyesítjük:

$$\{2\}_1 \cup \{2\}_2 = \{1, A_\pi\} \cup \{1, B_\pi\}.$$

Az egyesítést az elemek binér szorzata valósítja meg:

$$1 \quad A_\pi \\ B_\pi \left| \begin{array}{cc} 1 & A_\pi \\ B_\pi & A_\pi \cdot B_\pi \end{array} \right. = \{1, A_\pi, B_\pi, A_\pi \cdot B_\pi\}.$$

A 2.5 egyenlet értelmében $A_\pi \cdot B_\pi = C_\pi$, innen

$$\{2\}_1 \cdot \{2\}_2 = \{1, A_\pi, B_\pi, C_\pi\}.$$

A két $\{1, A_\pi\}$ és $\{1, B_\pi\}$ részcsoporthoz mellékosztályképzéssel is eljuthatunk a $\{2\}_1 \{2\}_2$ csoporthoz:

$$2, 2 \{2\} = \{1, A_\pi\} \cup B_\pi \cdot \{1, A_\pi\} = \{1, A_\pi, B_\pi, C_\pi\}$$

azaz

$$2, 2, \{2\} = D_2 = 222.$$

A $\{2\}_1 \cup \bar{2}\{2\}$ másodfajú csoport izomorf az elsőfajú csoporttal, ez a szorzótáblából kitűnik:

$$1 \quad A_\pi \\ B_\pi \{2\} \left| \begin{array}{cc} 1 & A_\pi \\ B_\pi & A_\pi B_\pi = C_\pi \end{array} \right. \quad 1 \quad A_\pi \\ \bar{B}_\pi \{2\} \left| \begin{array}{cc} 1 & A_\pi \\ \bar{B}_\pi & A_\pi \bar{B}_\pi = C_\pi \end{array} \right.$$

A másodfajú csoport tehát:

$$\{1, A_\pi, \bar{B}_\pi, \bar{C}_\pi\} = \{1, 2, m, m\}.$$

A 2.1 egyenlet miatt a kétfogású tengelyek egymással $\pi/2$ szöget zárnak be. Továbbá 2.7 és 2.8 értelmében, mivel a csoport elemei között 2 és m is szerepel

$$2 \cdot m_2 = m_{1, \pi/2}.$$

Azaz a kétfogású tengellyel kombinált tükörsík $\pi/2$ szögben egy további tükörsíkot generál. Így kapjuk meg a $2mm$ pontcsoportot (Schoenflies jelölés C_{2v}). A pontcsoportot axiometrikus és sztereografikus ábrázolásban a 4.3a ábra szemlélteti. A továbbiakban megelégszünk a sztereografikus ábrázolással.

$D_3, 223, \{3\}, \{2\}$ (2.6 ábra)

1. Ez a pontcsoport egy kétfogású és egy háromfogású elsőfajú pontcsoportból építhető fel:

$$1 \begin{vmatrix} 1 & B_{2\pi/3} & B_{-2\pi/3} \\ A_\pi & A_\pi B_{2\pi/3} & A_\pi B_{-2\pi/3} \end{vmatrix} = \{1, B_{2\pi/3}, B_{-2\pi/3}, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi\}.$$

Az ${}^1C_\pi$ és ${}^2C_\pi$ elemek a 2.5 egyenletből következnek, de a 2.7a ábra szerint szerkesztéssel is előállíthatók.

A 4.3b ábrából kitűnik, hogy míg az A_π , ${}^1C_\pi$ és ${}^2C_\pi$ műveletek a B tengelyt önmagába transzformálják, ez nem érvényes a B és A , 1C , 2C tengelyek viszonyára. Ezekre a tengelyekre a transzformációs egyenletek a következők:

$$B^{-1}(A)B = {}^2C^{-1}$$

$$B^{-1}({}^1C)B = A^{-1}$$

$$B^{-1}({}^2C)B = {}^1C^{-1}$$

A háromfogású tengelyek műveletei a kétfogású tengelyeket felcserélik. Továbbá a csoportnak nincs olyan művelete, mely a kétfogású tengelyek szemköztös végeit önmagukba transzformálná. Ezért ezek a tengelyek polárisak.

2. A mellékosztály képzésnél a $\{3\}$ részcsoporthoz kell kiindulni, mivel ennek indexe 2:

$$\{2\}\{3\} = \{3\} \cup {}^2\{3\} = \{1, B_{2\pi/3}, B_{-2\pi/3}, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi\}.$$

Az ezzel izomorf másodfajú csoport

$$\{3\} \cup {}^2\{3\} = \{1, B_{2\pi/3}, B_{-2\pi/3}, \bar{A}_\pi, {}^1\bar{C}_\pi, {}^2C_\pi\} = \{1, 3, \bar{2}\}.$$

Ez a $3m$ pontcsoport, melynek Schoenflies jelölése C_{3v} (4.3c ábra).

 $D_4, 224, \{2\}, \{4\}$ (2.6 ábra)

1. A dihedrális 224 pontcsoportot egy $\{2\}$ és egy $\{4\}$ részcsoporthoz uniója állítja elő:

$$\{2\} \cup \{4\} = 1 \begin{vmatrix} 1 & B_{\pi/2} & B_\pi & B_{-\pi/2} \\ A_\pi & A_\pi B_{\pi/2} & A_\pi B_\pi & A_\pi B_{-\pi/2} \end{vmatrix} = \{1, B_{\pi/2}, B_\pi, B_{-\pi/2}, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi, {}^3C_\pi\}.$$

A három kétfogású művelet a háromfogású B műveletet önmagába transzformálja, viszont a háromfogású B tengely műveleteire a kétfogású részcsoporthoz nem invariánsak. Ez a 4.1c ábrából közvetlenül kitűnik. A transzformációs egyenletek:

$$B^{-1}(A)B = {}^2C,$$

$$B^{-1}({}^1C)B = {}^3C,$$

$$B^{-1}(^2C)B = A^{-1},$$

$$B^{-1}(^3C)B = {}^1C^{-1}.$$

Másfelől a $B_{2\pi/2} = B_\pi$ művelet a kétfogású műveleteket ellenkező irányban önmagukba transzformálja, ezért a kétfogású tengelyek nem polárisak.

2. Ennek a csoportnak két 2-es indexű részcsoportha van:

$$\{4\} = \{1, B_{\pi/2}, B_{\pi/2}^2, B_{\pi/2}^3\}$$

$$\{2\}_1 \cdot \{2\}_2 = \{1, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi\}.$$

Ezért ebből a pontcsoportból kétféle elsőfajú mellékosztály állítható elő:

$$\{4\}, 2\{4\} = \{1, B_{\pi/2}, B_\pi, B_{-\pi/2}, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi, {}^3C_\pi\},$$

$$\{2\}, 4\{2\} = \{1, A_\pi, B_{\pi/2} \cdot A_\pi (= {}^1C_\pi), B_\pi, B_\pi \cdot A_\pi (= {}^2C_\pi), B_{-\pi/2}, B_{-\pi/2} \cdot A_\pi (= {}^3C_\pi)\}.$$

A megfelelő izomorf másodfajú csoportok:

$$\{4\}, \bar{2}\{4\} \cdot \{1, B_{\pi/2}, B_\pi, B_{-\pi/2}, \bar{A}_\pi, {}^1\bar{C}_\pi, {}^2\bar{C}_\pi, {}^3\bar{C}_\pi\} = \{1, 4, \bar{2}, \bar{2}, \bar{2}, \bar{2}\} = \{1, 4, m\}.$$

Ez a $4mm$ pontcsoport (Schoenflies jelölése C_{4v}). A másik izomorf lehetőség:

$$\{2\}, \bar{4}\{2\} = \{1, \bar{B}_{\pi/2}, B_\pi, \bar{B}_{-\pi/2}, A_\pi, {}^1\bar{C}_\pi, {}^2\bar{C}_\pi, {}^3\bar{C}_\pi\} = \{1, 2, \bar{4}, m\}.$$

Másképpen $\bar{4}2m$ (Schoenflies jelöléssel D_{2d}).

Mivel a csoport elemei között 2 és m is szerepel 2.6 miatt ($A_\pi \cdot m_2 = m_{1, \pi/2}$) egy kétfogású tengellyel kombinált tükrözés $\pi/2$ szögben egy másik tükröt generál. Az Euler egyenlet miatt a kétfogású tengelyek egymással $\beta/2 = \pi/2$ szöget zárnak be. (4.3c ábra).

$D_6, 226, \{2\}\{6\}$ (2.6 ábra)

1. Ez a pontcsoport két elsőfajú ciklikus csoport 2 és 6 egyesítéséből állítható elő:

$$\begin{array}{c} 1 \quad B_{2\pi/6} \quad B_{2\pi/3} \quad B_\pi \quad B_{-2\pi/3} \quad B_{-2\pi/6} \\ 1 \left| \begin{array}{ccccc} 1 & B_{2\pi/6} & B_{2\pi/3} & B_\pi & B_{-2\pi/3} & B_{-2\pi/6} \\ A_\pi & A_\pi & A_\pi \cdot B_{2\pi/6} & A_\pi B_{2\pi/3} & A_\pi B_\pi & A_\pi B_{-2\pi/3} & A_\pi B_{-2\pi/6} \end{array} \right. = \\ = \{1, B_{2\pi/6}, B_{2\pi/3}, B_\pi, B_{-2\pi/3}, B_{-2\pi/6}, A_\pi, {}^1C_\pi, {}^2C_\pi, {}^3C_\pi, {}^4C_\pi, {}^5C_\pi\}. \end{array}$$

A kétfogású tengelyek egymással $\alpha/2 = \pi/6$ szöget zárnak be. A $226(D_6)$ pontcsoport tehát 12-ed rendű. A kétfogású műveletekre a B csoport invariáns, viszont a kétfogású műveletek nem invariánsak B műveleteire. Mivel a B csoport B_π eleme a kétfogású tengelyek előjelét váltja, ezek a tengelyek nem polárisak.

2. A csoportnak két 2-es indexű részcsoportha van: $\{6\}$ és $\{32\}$; mivel $\{2\}$ is részcsoportha, két mellékosztályképzés lehetséges: $\{6\}, 2\{6\}$ és $\{32\}, 6\{32\}$. A $\{2\}$ részcsoportha elemei csupán reprezentánsok, mivel a $\{2\}$ részcsoportha indexe nem 2. Az izomorfia miatt a $\{6\}, \bar{2}\{6\}$ -ból kialakított másodfajú csoport:

$$\{1, B_{2\pi/6}, B_{2\pi/3}, B_\pi, B_{-2\pi/3}, B_{-2\pi/6}, \bar{A}_\pi, {}^1\bar{C}_\pi, {}^2\bar{C}_\pi, {}^3\bar{C}_\pi, {}^4\bar{C}_\pi, {}^5\bar{C}_\pi\}.$$

Az első sor $\{6\}$, a második sor $\bar{2}=m$, a csoport tehát rövidítve így írható: $\{1, 6, m\}$. Ez egy hatfogású tengely és egy tükör kombinációja. Mivel egy csoport két elemének szorzata szintén csoport elem, $6 \cdot m$ is eleme a csoportnak. Ezért a $6 \cdot m = A_\pi \cdot m_2 = m_{1, \pi/2}$ a 2.9 miatt további tükröket gerjeszt: $B_{2\pi/6} \cdot m_2 = m_{1, \pi/6}$ s. i. t. A tükröktehát egymással $\pi/6$ szöget zárnak be, ugyanúgy, mint 2.5 értelmében a kétfogású tengelyek.

226-ból másodfajú csoportot generál a $\{32\}$, $\bar{6}\{32\}$ is. A mellékosztályt és segítségével generált csoportot a hosszadalmas írásmód elkerülésére rövidítve mutatjuk be és hivatkozunk a mellékosztályképzést bemutató 3.2 és 3.3 összefüggésekre:

$$\begin{array}{cccccc} 1 & B_{2\pi/3} & B_{-2\pi/3} & A_\pi & {}^1C_\pi & {}^2C_\pi \\ \bar{B}_{2\pi/6} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & & & & & \\ \bar{B}_{-2\pi/6} & \dots & \dots & \dots & \dots & \bar{B}_{-2\pi/6} {}^2C_\pi \end{array} \quad (4.2)$$

A 4.2 elrendezés első sora a $\{32\}$ részcsoporthoz, első oszlopa: $\{\bar{6}\}$, a negyedik, ötödik és hatodik oszlop első elemei

$$A_\pi = 2, \quad {}^1C_\pi = 2, \quad {}^2C_\pi = 2.$$

A további elemek

$$\begin{array}{ccc} \bar{B}_{2\pi/6} \cdot A_\pi, & \bar{B}_{2\pi/6} \cdot {}^1C_\pi, & \bar{B}_{2\pi/6} \cdot {}^2C_\pi \\ \vdots & & \\ \bar{B}_{-2\pi/6} \cdot A_\pi & \dots & \bar{B}_{-2\pi/6} \cdot {}^2C_\pi \end{array}$$

Az $A_\pi \bar{B}_\beta = \bar{C}_\pi$ a 2.5 egyenlet szerint kétfogású rotoinverziók

$$B_{2\pi/6}^n \cdot i \cdot A_\pi = \bar{A}_\pi \cdot B_{2\pi/6}^n = {}^1\bar{C}_\pi$$

következésképpen a $\{32\}$, $\bar{6}\{32\}$ művelet a $\bar{6}2m = \frac{3}{m}2m(D_{3h})$ pontcsoporthoz állítja elő. A 2.7 egyenlet értelmében

$$B_{2\pi/3} \cdot m_2 = m_{1, \pi/3}.$$

Ugyanígy Euler egyenlete szerint a kétfogású tengelyek közti szögek értéke $2\pi/6 = \pi/3$. (4.3d ábra).

4. Izometrikus elsőfajú és belőlük generált másodfajú csoportok

$$233, T, \{3\}\{2\}\{2\} \quad (2.4 \text{ ábra})$$

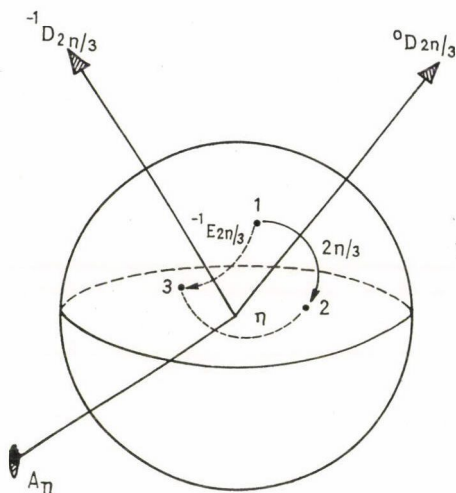
Ez a csoport két- és háromfogású tengelyek műveleteinek egyesítéséből építhető fel. A forgástengelyeket és hajlásszögeiket a 2. fejezetben tárgyaltuk (I. táblázat). A 2.4 és 4.1 ábra szerint a két gerjesztő részcsoporthoz $\{2\}_1\{2\}_2$ és $\{3\}$. A két részcsoporthoz egyesítését

$$\{3\} \cup \{2\}_1\{2\}_2 = \{1, D_{2\pi/3}, D_{-2\pi/3}\} \cup \{1, A_\pi, B_\pi, C_\pi\}$$

az alábbi szorzótábla szolgáltatja

	1	A_π	B_π	C_π
1	1	A_π	B_π	C_π
$D_{2\pi/3}$	$D_{2\pi/3}$	$D_{2\pi/3}A_\pi$	$D_{2\pi/3}B_\pi$	$D_{2\pi/3}C_\pi$
$D_{-2\pi/3}$	$D_{-2\pi/3}$	$D_{-2\pi/3}A_\pi$	$D_{-2\pi/3}B_\pi$	$D_{-2\pi/3}C_\pi$

A 4.1 ábrából kitűnik, hogy az 1 ponttal jelzett motívum 0D körül $2\pi/3$ -mal elforgatva a 2. helyre, majd onnan A_π körül megforgatva a 3-ba kerül. Ez ugyanaz, mintha 1-et 1D körül ellenkező irányban ($-2\pi/3$ -mal) elforgatva 1-ből közvetlenül 3-ba vittük volna. A két- és háromfogású rotációk kombinációjánál az előjelekre figyelemmel



4.1 ábra

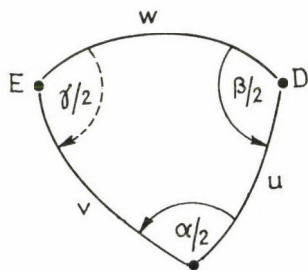
kell lenni (4.2 ábra). Ezért

$$\{3\}\{2\}\{2\} = \left\{ \begin{array}{cccc} 1 & A_\pi & B_\pi & C_\pi \\ {}^0D_{2\pi/3} & {}^1D_{-2\pi/3} & {}^2D_{-2\pi/3} & {}^3D_{-2\pi/3} \\ {}^0D_{-2\pi/3} & {}^1D_{2\pi/3} & {}^2D_{2\pi/3} & {}^3D_{2\pi/3} \end{array} \right\}$$

A részcsoporthok első-, másod-, harmad-, illetve negyedrendűek:

$$\{1\}, \{2\} = \{1, A_\pi\}, \{3\} = \{1, D_{2\pi/3}, D_{-2\pi/3}\}$$

$$\{2\}_1\{2\}_2 = \{1, A_\pi, B_\pi, C_\pi\}.$$



4.2 ábra

Mivel maga a $\{3\}\{2\}\{2\}$ csoport 12-ed rendű, a csoportnak nincs 2-es indexű részcsoportha. Ebből a csoportból tehát mellékosztályképzéssel másodfajú csoport nem generálható.

432, 0, $\{3\}\{2\}\{2\}$ (2.4 ábra)

1. Ez a pontcsoport a $\{3\}\{2\}\{2\}$ részcsoportokból egyesíthető. Itt két olyan részcsoportha művelet lehetséges, amely az oktaéder két szomszédos sarkait felcseréli. Az egyik az oktaéder lapokra merőleges négyfogású A , B , illetve C tengelyek körüli elforgatás $\pi/2$ -vel, a másik lehetséges művelet az oktaéder éleket metsző kétfogású

$${}^0F, {}^1F, {}^2F, {}^3F, {}^4F \text{ és } {}^5F$$

tengelyek körüli elforgatás π -vel. A háromfogású tengelyek jelölése: 0D , 1D , 2D és 3D .

Az O pontcsoportnak három négyfogású, négy háromfogású és hat kétfogású szimmetria tengelye van. A pontcsoport generálásához a

$$\{2\} = \{1, {}^0F_\pi\}$$

másodrendű részcsoportha az eddig ismételten bemutatott eljárás szerint a többi részcsoportha szimmetria-elemeivel kombináljuk. A kombinációk a következő 24-ed rendű csoportot szolgáltatják:

$$\{3\}\{2\}\{2\}\{2\} = \{1, A_{\pi/2}, A_\pi, A_{-\pi/2}, B_{\pi/2}, B_\pi, B_{-\pi/2}$$

$$C_{\pi/2}, C_\pi, C_{-\pi/2}$$

$${}^0D_{2\pi/3}, {}^0D_{-2\pi/3}$$

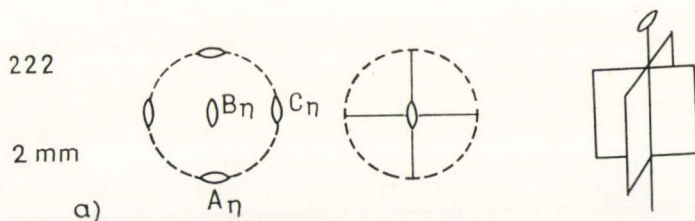
$${}^1D_{2\pi/3}, {}^1D_{-2\pi/3}, {}^2D_{2\pi/3}, {}^2D_{-2\pi/3}, {}^3D_{2\pi/3}, {}^3D_{-2\pi/3}$$

$${}^0F_\pi, {}^1F_\pi, {}^2F_\pi, {}^3F_\pi, {}^4F_\pi, {}^5F_\pi\}.$$

2. A mellékosztályképzéshez egyedül a $\{23\}$ részcsoportha jöhet tekintetbe, mivel ennek indexe 2. A $\{23\}$ rendje ugyanis 12, elemeinek száma tehát fele a teljes csoport elemei számának. A másodfajú csoport generálása az eddigiek szerint

$$\bar{G}_0 = \{23\}, \bar{2}\{23\}.$$

A hosszadalmas valamennyi elemet tartalmazó felírás helyett leegyszerűsített alakot használunk.

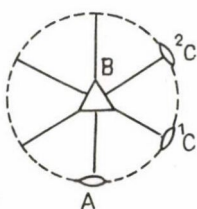


4.3a* ábra

223

3m

b)



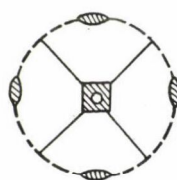
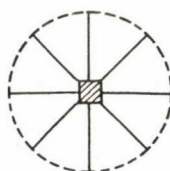
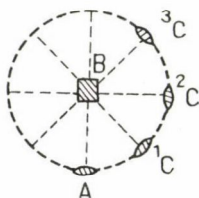
4.3b* ábra

224

4mm

 $\bar{4}2m$

c)



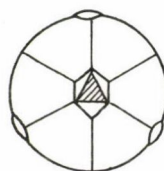
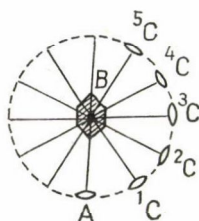
4.3c* ábra

226

6mm

 $\bar{6}2m =$ $= \frac{3}{m} 2m$

d)



4.3d* ábra

A 432 (0) pontcsoport az alábbi részcsoportokat tartalmazza:

$$\{4\} = \{1, B_{\pi/2}, B_{\pi}, B_{-\pi/2}\},$$

$$\{3\} = \{1, D_{2\pi/3}, D_{-2\pi/3}\},$$

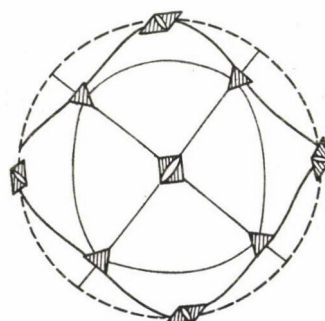
$$\{2\} = \{1, F_{\pi}\}.$$

A másodfajú művelet $\{23\}$, $\bar{4}\{23\}$; a csoport elemei:

$$\{1, \bar{B}_{\pi/2}, B_{\pi}, \bar{B}_{-\pi/2}, D_{2\pi/3}, D_{-2\pi/3}, \bar{F}_{\pi}\} = \{1, 3, \bar{4}, m\}$$

azaz $\bar{4}3m$, Schoenflies jelölése szerint T_d , (4.3e ábra).

Az eddig tárgyalt pontcsoportok (1, 2, 3, 4, 6, 222, 223, 224, 226, 233, 234, m , $2mm$, $3m$, $4mm$, $\bar{4}2m$, $6mm$, $\bar{6}2m$ és $\bar{4}3m$) sztereografikus ábrázolását a 2.5, 2.6, valamint a 4.3 ábrák tartalmazzák.

 $T_d, \bar{4}3m$

4.3e* ábra

5. Inverziós részcsoporttal ($\{1, i\}$) képzett pontcsoportok

Az inverziós művelet jellegzetessége, hogy minden rotációt önmagába transzformál. Mindenekelőtt kimutatható, hogy

$$i^{-1} = i.$$

Tekintsünk egy A_α rotációs elemet:

$$i^{-1}A_\alpha = (A_{\alpha,i})^{-1}A_\alpha = i^{-1}A_\alpha^{-1}A_\alpha = i.$$

Ebből következik, hogy

$$i^{-1} \cdot A_\alpha \cdot i = A_\alpha$$

mivel egymásután elvégzünk egy inverziót, egy rotációt és egy újabb inverziót. Ez a három művelet ekvivalens egyetlen A_α rotációval.

Az elmondottak miatt tehát további pontcsoportokat kapunk, ha az 1, 2, 3, 4 és 6, valamint a 222, 223, 224, 226, 233 és 234 pontcsoportokat az

$$\{i\} = \{1, i\}$$

részcsoporttal kombináljuk.

Az inverziós csoporttal kombinált rotációk az $n=1$ és $n=3$ fogás-számú tengelyek kivételével olyan tükröket generálnak, melyek a rotációs tengelyekre merőlegesek. Az inverziót tartalmazó pontcsoportokhoz úgy jutunk, hogy fenti részcsoportokat szorzótáblákba foglaljuk:

$$n = 1, \{1\}\{1, i\} = \bar{1}$$

$$n = 2, \{2\}\{i\} = \begin{array}{c|cc} & 1 & A_\pi \\ \hline 1 & 1 & A_\pi \\ i & i & A_\pi \cdot i \end{array} = \{1, 2, i, m\}: \frac{2}{m}.$$

Ezt a pontcsoportot az általános csoportelméletet tárgyaló 3. fejezetben mátrix képzéssel már levezettük. A Bevezetés 1.2 ábrájából közvetlenül látható, hogy minden inverzióval kombinált kétfogású rotációs művelet (elforgatás π -vel) egy a forgástengelyre merőleges tükröt generál.

A négy- és hatfogású tengelyek rotációs műveletei szintén tartalmazzák a π -vel való elforgatást, így ezek az elemek is kombinálva i -vel (pontosabban az $\{i\} = \{1, i\}$ csoporttal) egy rájuk merőleges tükröt generálnak. Továbbá a négyfogású tengely π rotációja a tengely $\pi/2$ elfordulásaihoz képest további olyan rotációkat eredményez

$$\left(\frac{\pi}{2} + \pi = \frac{3\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} + \pi = \frac{5\pi}{2}, \frac{5\pi}{2} - \pi = \frac{\pi}{2}\right)$$

melyek a motívumot $\pi/2$, $3\pi/2$ helyzetbe viszik. Mindezek inverzióval kombinálva egy négyfogású forgástengelyre merőleges tükröt generálnak ($4/m$ pontcsoport).

Tekintsük a 222 pontcsoportnak az $\{1, i\}$ csoporttal való kombinációját. A szorzótábla így alakul:

$$\begin{array}{c|cccc} & 1 & A_{\pi/2} & A_\pi & A_{-\pi/2} \\ \hline 1 & 1 & A_{\pi/2} & A_\pi & A_{-\pi/2} \\ i & i & A_{\pi/2} \cdot i & A_\pi \cdot i & A_{-\pi/2} \cdot i \end{array} = \{1, A_{\pi/2}, A_\pi, A_{-\pi/2}, i, A_{\pi/2} \cdot i, A_\pi \cdot i, A_{-\pi/2} \cdot i\}.$$

Ez a csoport a következő részcsoportokat tartalmazza:

$$\left. \begin{aligned} \{4\} &= \{1, A_{\pi/2}, A_{\pi}, A_{-\pi/2}\} \\ \{2\}\{i\} &= \{1, 2, i, m\}: \frac{2}{m}, C_{2h} \\ \{4\} &= \{1, A_{\pi/2} \cdot i, A_{\pi} i, A_{-\pi/2} \cdot i\} \end{aligned} \right\} : \frac{4}{m}, C_{4h}.$$

Ugyanez érvényes a $\{6\}\{i\}$ kombinációra, amely a $6/m$ pontcsoportot gerjeszti.

A $\{3\}\{i\}$ kombinációban a rotáció nem tartalmaz π -elforgatást, ezért ebben az esetben $n=3$ -ra merőleges tükör nincs. Az ide tartozó pontcsoport egyszerűen $\bar{3}$.

A több tengelyből álló (heterociklikus) csoportoknak az $\{1, i\}$ csoporttal való kombinációi szorzótábláik szerint egyszerűen így alakulnak:

$$222 \cdot i \quad \{2\}_1 \{2\}_2 \{i\}: \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

$$223 \cdot i \quad \{2\}\{3\}\{i\}: \bar{3} \frac{2}{m}$$

$$224 \cdot i \quad \{4\}\{2\}\{i\}: \frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

$$226 \cdot i \quad \{6\}\{2\}\{i\}: \frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$$

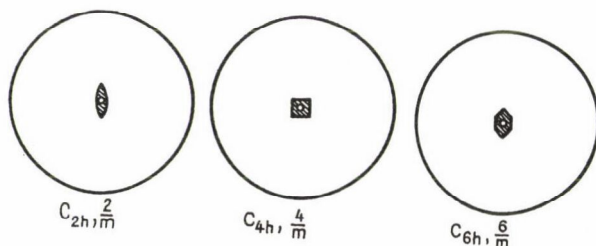
$$233 \cdot i \quad \{23\}\{i\}: \frac{2}{m} \bar{3}$$

$$234 \cdot i \quad \{3\}\{2\}\{2\}\{2\}\{i\}: \frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}.$$

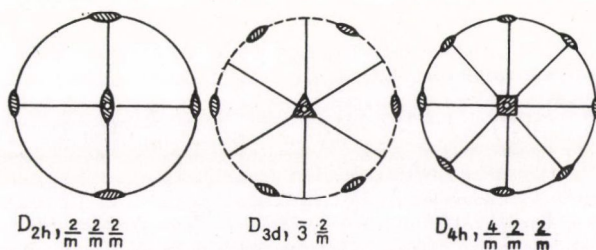
Megjegyzendő, hogy valamennyi ebbe a kategóriába tartozó pontcsoport $\bar{1}$ és $\bar{2}$ kivételével részcsoportként tartalmazza a $\{2\}\{i\} = \{1, 2, i, m\}$ másodfajú csoportot. Valamennyi részcsoport az eddig előadottak alapján könnyen előállítható.

Az ebben a fejezetben tárgyalt pontcsoportok szférikus ábrázolását a 4.4 ábra tartalmazza.

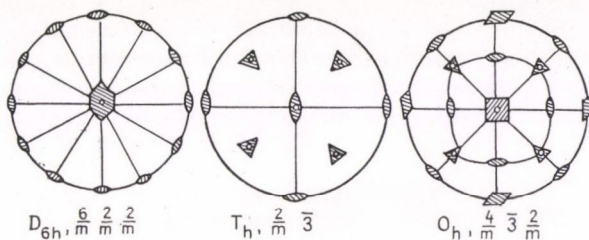
4.5 valamennyi pontcsoport csoportképzésének folyamatábrája.



4.4a* ábra



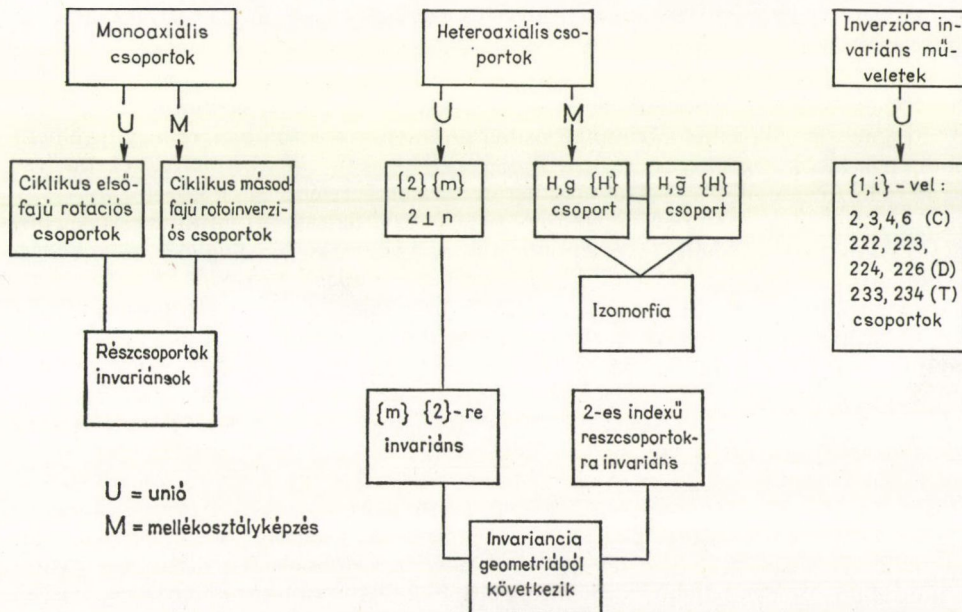
4.4b* ábra



4.4c* ábra

5. NÉHÁNY MORFOLÓGIAI MEGJEGYZÉS

Könnyen belátható, hogy bármilyen két, egymást nem metsző tengely körüli rotáció szükségképpen tranzlációt is tartalmaz. Ezért a pontcsoportok tárgyalásából a tranzláció, mint szimmetriaművelet eleve kizárt (a pontcsoportok tengelyei met-



4.5 ábra

szik egymást). Ha viszont egy két vagy több tengelyből álló olyan rendszerbe, melyben a tengelyek egymást egy pontban metszik, valamilyen tetszőleges motívumot helyezünk és a motívum a tengelyek körüli rotáció közben minden helyzetben a tengelyek metszéspontjától egyenlő távolságban marad, a motívum szükségképpen egy gömbfelületen mozog. Ez a tény tette lehetővé a pontcsoportok levezetésénél a gömbháromszógtan Euler-féle konstrukciójának alkalmazását.

Megállapításunk azonban nem vonatkozik csak valamilyen motívumra. Síkoknak, illetve síkok rendszerének is lehet rotációs szimmetriája. Ebben az esetben a tengelyek metszéspontjától egyenlő távolságban levő síkok olyan poliédert alkotnak, melynek felületei a tengelyek metszéspontjától ugyanolyan messze esnek. A rendszerhez ezen felül tartozhatnak olyan síkok is, melyek nincsenek mind egyenlő távolságra a szimmetriatengelyek metszéspontjától, egymáshoz viszonyított helyzetük azonban első- vagy másodfajú szimmetriaműveletekre invariánsak. Az ilyen több ekvivalens síkból álló, de ekvivalenciában egymástól eltérő rendszerek komplex poliédereket alkotnak. Mivel minden olyan rotáció, amely egy motívumot megismétel, szimmetriaművelet, a megengedett rotációs tengelyek egyúttal poliéderekre is vonatkozó lehetséges szimmetriaelemek. Ez a megállapítás másodfajú rotációkra természetesen is általánosítható.

Növekedés közben a kristályok egyes síkjai, megfelelő körülmények között, erőteljesebben alakulnak ki. Ez elsősorban oldatból való növekedésre áll. A kialakuló kristályok így poliéderek, melyeknek egymást metsző tengelyeik vannak. Ez tapasztalati tény, ezért lehet a pontcsoportokat az ötféle lehetséges forgástengelyből felépíteni. További alapvető tény, hogy a megengedett tengely fogásszámnak megfelelő rotációs szögek, valamint azok a szögek, amelyekkel több rotációs tengely kombinálható minden tranzlációval szemben invariánsak. Emiatt lehet a 32 pontcsoportot a rotációs tengelyek szimmetriaműveleteiből csoportelméletileg, tehát absztrakt algebra segítségével, levezetni.

Kedvező körülmények között a kristálynövekedés úgy alakul, hogy a kristályfelületek egyenletesen növekednek. Minden ilyen külső felület párhuzamos felületek együttesének megfigyelhető szimmetriasíkja. A kristálymorfológiailag megfigyelhető szimmetria síkok alacsony indexűek. Ennek fizikai okai vannak, melyeknek tárgyalása nem tartozik ennek az összefoglaló értekezésnek keretébe. Az a körülmény, hogy a szóban levő síkok szimmetria szempontjából ekvivalensek egyúttal azt is jelenti, hogy e síkok fizikai és kémiai szempontból is ekvivalensek. Ha megfelelő növekedési körülmények mellett egy síksereg a növekedés során meghatározott állapotot elért, az összes többi síksereg is a nekik megfelelő helyzetbe került. Ezért a kristálymorfológia tárgya a pontcsoport szimmetria. Ily módon minden kristály morfológiai alapon valamely pontcsoportba sorolható. Megjegyzendő azonban, hogy a morfológiailag megállapított kristályszimmetria eltérhet a kristály valódi pontcsoportjától valahányszor a növekedési körülmények nem teszik lehetővé az alacsony indexű kristálytani síkok egyenletes növekedését. Innen a röntgendiffrakciós módszerek nagy jelentősége egyes kristályok pontcsoportbeli hovatartozásának meghatározására.

Az egyes pontcsoportokhoz tartozó poliéderek (pedion, pinacoid, szfenoid, különféle piramisok stb) részletes leírása minden krisztallográfiai, illetve ásványtani monográfiában megtalálható, tárgyalásuk meghaladná e munka kereteit.

FÜGGELÉK

1. Izomorfia

Izomorf például a következő két csoport:

$$\begin{array}{cccc} G_1 = \{ I, & a, & a^2, & a^3 \} \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ G_2 = \{ 1, & i, & -1, & -i \}. \end{array}$$

A kölcsönös egyértelmű megfeleltetést az elemek közti nyilak szemléltetik.

G_1 leképzése G_2 -re a szorzótábla segítségével így alakul:

	I	a	a^2	a^3	
I	I	a	a^2	a^3	} 1
	1	i	-1	$-i$	
a	a	a^2	a^3	$a^4 = I$	} 2
	i	-1	$-i$	1	
a^2	a^2	a^3	$a^4 = I$	a	} 3
	-1	$-i$	1	i	
a^3	a^3	$a^4 = I$	a	a^2	} 4
	$-i$	1	i	$-i$	

Az 1, 2, 3 és 4 sorokban mindig ugyanazok az elemek felelnek meg egymásnak, melyeket eleve megfeleltettünk. Az izomorfia következménye, hogy, ha egy G_1 csoport szorzótáblája ismert, ismerjük a másik, G_1 -gyel izomorf, G_2 csoport szorzótábláját is

2. Transzformáció

Adot tegy $[A]$ forgástengely, amely egy motívumot valamilyen 1-gyel jelzett pozícióból 2-be visz. Egy másik $[B]$ forgástengely a motívumot 2-ből 3-ba forgatja, majd az $[A]$ tengely a motívumot átviszi 4-be.

Ha az A műveletet 1-ből 2-be A^{-1} -gyel és 3-ból 4-be A -val jelöljük, fentiek szerint a következő műveleteket végezzük el:

$$\begin{array}{ll} 1 \xrightarrow{A^{-1}} 2 \\ 2 \xrightarrow{B} 3 \\ 3 \xrightarrow{A} 4 \end{array} \quad F.1.$$

Ha működik egy $[B']$ tengely, mely 1-gyet elforgatja 4-be, akkor $F.1.$ helyett írhatjuk:

$$1 \xrightarrow{B'} 4$$

Érvényes tehát a következő transzformációs egyenlet:

$$A^{-1} \cdot B \cdot A = B' \quad F.2.$$

Ez az egyenlet tranzlációra is érvényes, ha az A^{-1} illetve A rotációkat T tranzlációval helyettesítjük

$$T^{-1} \cdot B \cdot T = B'.$$

Tegyük fel, hogy a B és A műveletek felcserélhetők, azaz

$$B \cdot A = A \cdot B.$$

Mindkét oldalt szorozva A^{-1} -gyel

$$A^{-1} \cdot B \cdot A = A^{-1} \cdot A \cdot B = B.$$

Ebben az esetben az $A^{-1}()$ A transzformációs operátor a B műveletet önmagába transzformálja. A B művelet a transzformációra invariáns. F.2.-ben ez az invariancia nem áll fenn. B és B' műveletek egymás konjugáltjai.

Összinté köszönetemet fejezem ki Dr. Sasvári Kálmánnak értékes diszkusszióért, valamint a J. Wiles. New York kiadóvállalatnak a *-gal megjelölt ábrák M. Buerger, Elementary Crystallography, 1978. c. monográfiájából való átvételének engedélyezéséért.

IRODALOM

1. International Tables for X-ray Crystallography.
vol. 1. ed. by N. F. N. Henry and Kathleen Lonsdale, XVIII, 444, 1952.
vol. 2. ed. by John S. Kasper and Kathleen Lonsdale, XVIII, 444, 1959.
vol. 3. ed. by Caroline H. MacGillivray and Gerard D. Rieke, general editor Kathleen Lonsdale, XVI, 362, 1962.
Kyrack Press, Birmingham.
2. W. Kleber, Einführung in die Kristallographie 5. Aufl., 366. Veb. Verl. Technik, Berlin, 1961.
3. Martin Buerger, Elementary Crystallography, XXIII, 528, The MIT Press, Cambridge Massachusetts and London, 1978.
4. A. V. Shubnikov and V. A. Koptsik, Symmetry in Science and Art (Szimmetrija v nauke i isskustre, translated by G. D. Archard) XXV, 420, Plenum Press, New York, London, 2nd printing, 1977.
5. M. P. Saszkolszkaja, Krisztallografija, 302, Vjiszszaja Skola, Moszkva, 1976.
6. Carl W. Correns, Einführung in die Mineralogie, zweite Aufl., XII, 458, Springer Verl. Berlin, New York, 1968.
7. Náray-Szabó I., Kristálykémia, 514. Akadémia Kiadó, Budapest, 1965.
8. M. M. Woolfson, An Introduction to X-Ray Crystallography, IX, 380, University Press, Cambridge, 1970.
9. L. V. Azaroff, Elements of X-Ray Crystallography, XVI, 610, McGraw Hill, New York, 1968.
10. W. L. Bond, Crystal Technology, XI, 342, John Wiley, New York, 1976.
11. M. F. C. Ladd, R. A. Palmer, Structure Determination by X-Ray Crystallography, XVI, 393, Plenum Press, New York, London, 1977.
12. R. Keown, An Introduction to Group Representation Theory. XI, 331, Academic Press, New York, London, 1975.
13. Wigner Jenő, Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában (Group Theory and its Application to Quantum Mechanics of Atomic Spectra, fordította, György Géza és Sebestyén Ákos), 391, Akadémia Kiadó, Budapest, 1979.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat nyomdába érkezett: 1981. XII. 21. — Terjedelem: 11,2 (A5) ív

81-5494 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató



Ára: 15,— Ft

Előfizetés kötetenként: 90,— Ft

INDEX: 26 491

ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

HŐKEZELÉS HATÁSA A FÉMEK HIBASZERKEZETÉRE

Szerkesztette

KOVÁCS ISTVÁN

1. Kovács István: Hibaeltűnési folyamatok fémekben 375
2. Bérces György: Ponthiba eltűnés befagyasztott fémekből 379
3. Vörös György: Megújulási folyamatok besugárzott fémekben 403
4. S. Tóth László: Ponthiba eltűnési folyamatok alakított fémekben 417
5. Lendvai János: Deformációs tárolt energia 435
6. Ungár Tamás: Megújulási folyamatok fémekben 447

— • —

- Morlin Zoltán: Kristálystruktúrák csoportelmélete I. Pontcsoportok 465

307.22 6

✓

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

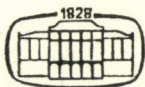
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXX. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1982

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

HŐKEZELÉS HATÁSA A FÉMEK HIBASZERKEZETÉRE

7. A REKRISZTALLIZÁCIÓ HAJTÓ ÉS FÉKEZŐ ERŐI

HONYEK GYULA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	501
2. Definíciók	502
3. Hajtóerők	503
3.1. A hidegalakításból származó tárolt energia	503
3.2. Szemcsehatár energia	503
3.3. A szabad felületek energiája	503
3.4. Nemfolytonos precipitáció	504
4. Fékező erők	505
4.1. Idegen fázisú részecskék (Zener-fékezés)	505
4.2. Oldott atomok	506
4.3. Felületi barázdáltság	507
5. A szemcsehatár görbülete szerepe	508
5.1. Kisméretű szemcsére ható erő	508
5.2. A határgörbülete szerepe a tercier rekrisztallizációban	508
5.3. Ék alakú mintában ható erő	509
5.4. Folyamatos szemcsenövekedés	509
6. Egyensúly a hajtó- és a fékezőerők között	510
6.1. Második fázisú részecskék által meghatározott szemcseméret	510
6.2. A mintavastagság hatása	510
6.3. Küszöb deformáció a primér rekrisztallizáció létrejöttéhez	511
7. Összefoglalás	511
8. Irodalom	512

1. BEVEZETÉS

A rekrisztallizáció folyamata nagyszögű szemcsehatárok mozgásával megy végbe, aminek eredményeként a rendszer teljes szabad entalpiája csökken. Ezt a tényt felhasználhatjuk „hajtóerők” definiálására és megbecsülhetjük ezek nagyságát. Ilyen hajtóerők származhatnak a hidegalakítás tárolt energiájából, a finom szemcsés mátrix szemcsehatárainak energiájából, a kristály makroszkopikus külső felületi energiájából, a túltelített szilárd oldat és az egyensúlyi kiválások entrópia különbségéből stb. A hajtóerők eredményezik bizonyos szemcsék növekedését. Ugyanakkor létezhetnek más hatások, pl. oldott atomoktól, idegen fázisú részecskéktől, vagy felületi barázdáltságtól, amelyek gátolják a szemcsehatárok mozgását és így „fékező erőknek” tekinthetők.

Ebben a dolgozatban egyszerű modellek segítségével tekintjük át a rekrisztallizáció hajtó és fékező erőit, majd ezekre közelítő formulákat és nagyságrendi becsléseket határozunk meg. Megvizsgáljuk a hajtó- és fékezőerők egyensúlyának feltételeit,

majd néhány jól ismert rekrisztallizációs jelenség modellszerű tárgyalását adjuk. A következő fejezetekben a rekrisztallizáció különböző típusainak részletes tárgyalásával mutatjuk be a fenti modellek alkalmazhatóságát, valamint azt, hogy valódi anyagok esetén milyen összetett hatások befolyásolják a rekrisztallizációt.

2. DEFINÍCIÓK

A rekrisztallizációt általában a nagyszögű szemcsehatárok vándorlásaként definiálják [1]. A határ spontán mozgása akkor következik be, ha ezáltal a rendszer szabad entalpiája csökken. A továbbiakban egyszerű modellek segítségével megvizsgáljuk, milyen folyamatok útján csökkenhet a rendszer szabad entalpiája [2]. Leggyakrabban az 1. ábrán látható modellt fogjuk használni, amelyben egy F keresztmetszetű és L hosszúságú hengeres testet az x helyen egy szemcsehatár két részre oszt. Az I. rész egy deformációmentes fémes szemcse, míg a II. rész lehet pl. egy polikristályos tartomány, vagy egy eltérő orientációjú egykristály is.

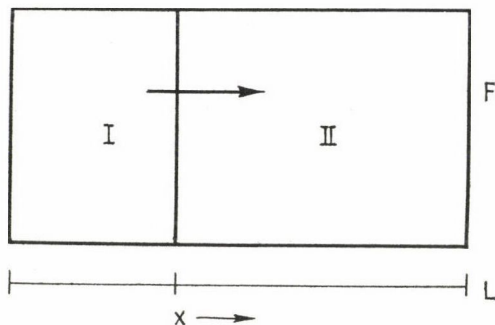
Legyen g_I és g_{II} a két rész egységnyi tárfogataira eső szabad entalpia. Ekkor a rendszer teljes szabad entalpiáját a következőképpen írhatjuk fel:

$$G_t = F[xg_I + (L-x)g_{II}]. \quad (1)$$

Ha $g_{II} > g_I$, akkor a határ jobbra történő elmozdulása G_t értékét csökkenti. Az ebből származó p hajtóerőt a következőképpen definiáljuk:

$$p = -\frac{1}{F} \frac{dG_t}{dx} = g_{II} - g_I = \Delta g. \quad (2)$$

Ha g_I és g_{II} J/m^3 -ben adottak, akkor p egysége N/m^2 . Természetesen ezen egységnyi felületre ható erő valójában nem mérhető és a határ sem tekinthető



1. ábra. Szemcsehatár egy növekvő kristály (I) és a minta maradék része (II) között

mechanikai testnek, amelyre külső erők képesek hatni. Ennek ellenére a (2) egyenlettel definiált hajtóerő fogalma általánosan elfogadott, és ebben a dolgozatban mi is ebből a szempontból vizsgáljuk a rekrisztallizáció folyamatát.

Egy rendszer szabad entalpiája sokféle okból csökkenhet szemcsehatár-mozgás segítségével, és ezek mindegyikéhez egy p_i hajtóerőt rendelhetünk. A szemcsehatár-mozgást akadályozó fékező erőket a hajtóerőkkel ellentétes előjellel kell figyelembe venniünk. Természetesen valamennyi erő a szemcsehatár normálisának irányába mutat. Az eredő hajtóerő tehát így írható:

$$p = \sum_i p_i, \quad (3)$$

amivel a határ mozgási sebessége definíció szerint:

$$v = mp, \quad (4)$$

ahol m -et a határ mozgékonyságának nevezzük.

3. HAJTÓERŐK

3.1. A hidegalakításból származó tárolt energia

Egy hosszegységnyi diszlokáció szakasz energiája közelítőleg Gb^2 , ahol G a nyírási modulusz és b a Burgers-vektor [3]. Legyen q_1 és q a diszlokáció-sűrűség az 1. ábrán látható modell I. és II. részében, akkor az ebből eredő hajtóerő:

$$p_e \cong Gb^2(q - q_1). \quad (5)$$

Ha az I. rész egy rekrisztallizált szemcse és a II. tartomány a deformált mátrix, akkor $q \gg q_1$, és így:

$$p_e \cong qGb^2. \quad (6)$$

Ez a primer rekrisztallizáció (8. fejezet) hajtóereje. Ténylegesen p_e függ a diszlokációk eloszlásától is. Például azonos diszlokáció-sűrűség mellett, egy poligonizált kristály szabad entalpiája alacsonyabb, mint egy deformált és nem megújult kristályé [3], ezek a különbségek azonban p_e nagyságrendjét nem változtatják meg. Például egy hidegen hengerelt fém esetén, ahol a diszlokáció sűrűség elérheti a $q \cong 10^{16}/\text{m}^2$ értéket, $Gb^2 \cong 10^{-8}$ J/m energiával a hajtóerő közelítőleg 10^8 N/m².

3.2. Szemcsehatár energia

Legyen most az 1. ábrán az I. rész egy nagyméretű szekunder szemcse, amely a finomszemcsés primer mátrix felé növekszik, melynek átlagos szemcsemérete D . Jelölje γ_B a szemcsehatárok fajlagos felületi energiáját, tekintsük továbbá valamennyi szemcsét D oldalélű kockának, amely D^2 szemcsehatár felületen érintkezik a szomszédjával. Ekkor a hajtóerőt a következő alakban kapjuk:

$$p_B = \frac{6D^2\gamma_B}{2D^3} = \frac{3\gamma_B}{D}. \quad (7)$$

Ez a normál szemcsenövekedés és a szekunder rekrisztallizáció (11. fejezet) hajtóereje. A hajtóerő kifejezésében a számfaktor azonban általában a szemcsék geometriai alakjától függ. Ha (7)-ben $\gamma_B = 3 \cdot 10^{-1}$ J/m² és $D = 10^{-4}$ m, akkor a hajtóerőre $p_B \cong 10^4$ N/m² értéket kapunk.

3.3. A szabad felületek energiája

Tételezzük fel ezúttal, hogy az 1. ábrán látható minta egy vékony lemez, és az I. és II. tartományok különböző orientációjú egykristályok, vagyis különböző kristálytani síkjaik lesznek párhuzamosak a minta szabad felületével, és így azokhoz különböző γ_s fajlagos szabad felületi energia tartozik. Ez az előzőkhöz hasonló

módon a következő hajtóerőre vezet:

$$p_F = \frac{2\Delta\gamma_s}{w}, \quad (8)$$

ahol w a lemez vastagsága. Ez a hajtóerő eredményezi a tercier rekrisztallizációt (11. fejezet). $\Delta\gamma_s$ nemcsak a két kristály orientációjától, hanem a mintát körülvevő közegtől is függ. Ezt változtatva lehetséges, hogy a $\Delta\gamma_s$ előjele is megváltozik, ami a szemcsehatár-mozgás irányának megváltozásával jár együtt. Ezt az effektust már kísérletileg is kimutatták [4].

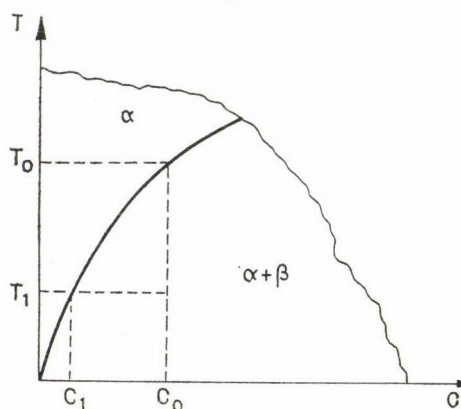
Ennek a hajtóerőnek a nagyságrendjét is megbecsülhetjük. A $\Delta\gamma_s \cong 5 \cdot 10^{-2} \text{ J/m}^2$ és $w = 10^{-4} \text{ m}$ értékeket feltételezve a hajtóerőre $p_F \cong 10^3 \text{ N/m}^2$ adódik.

3.4. Nemfolytonos precipitáció

A nemfolytonos precipitációt nem mindig tekintik rekrisztallizációs folyamatnak, annak ellenére, hogy ugyanúgy mint a rekrisztallizációnál, az elemi folyamat ekkor is egy nagyszögű szemcsehatár mozgása. A határ előtti tartományban túltelített szilárd oldat helyezkedik el, míg a határ mögött egy kétfázisú ötvözetet találunk, amely már sokkal közelebb áll a termodinamikai egyensúlyhoz. A moláris szabad entalpiakülönbség, amelyet újra a mozgó határra ható hajtóerőnek lehet tekinteni, a következőképpen adható meg [5, 6]:

$$\Delta g = \frac{U}{V} [c_0(1-c_0) - c_1(1-c_1)] + \frac{RT_1}{V} [c_0 \ln c_0 - c_1 \ln c_1 + (1-c_0) \ln (1-c_0) - (1-c_1) \ln (1-c_1)], \quad (9)$$

ahol V a móltérfogat, U az oldódáshő, c_0 az ötvözet koncentrációja, T_1 a hőkezelési hőmérséklet és c_1 a T_1 -nek megfelelő oldhatóság, amint az a 2. ábráról leolvasható. Kis koncentrációk esetén a (9) kifejezés egyszerűsödik:



$$\Delta g \cong \frac{U}{V} (c_0 - c_1) + \frac{RT_1}{V} (c_0 \ln c_0 - c_1 \ln c_1). \quad (10)$$

U értéke megbecsülhető az oldhatósági görbe alábbi közelítő egyenletéből [7]:

$$c \cong e^{-\frac{U}{RT}}. \quad (11)$$

2. ábra. Kétalkotós egyensúlyi fázisdiagram részlete a szilárd oldhatósági határral

A fenti összefüggés megfelelő értékeit behelyettesítve, a (10) egyenlet így alakul:

$$\Delta g = p_c \cong \frac{R}{V} (T_1 - T_0) c_0 \ln c_0. \quad (12)$$

Például Cu-4.9at% Ag ötvözet esetén 779 °C-on szilárd oldat állapotot találunk, míg 300 °C-ra edzve az ötvözetet, nemfolytonos precipitáció játszódik le, amelyre a hajtóerő: $p_c \cong 6 \cdot 10^3 \text{ N/m}^2$.

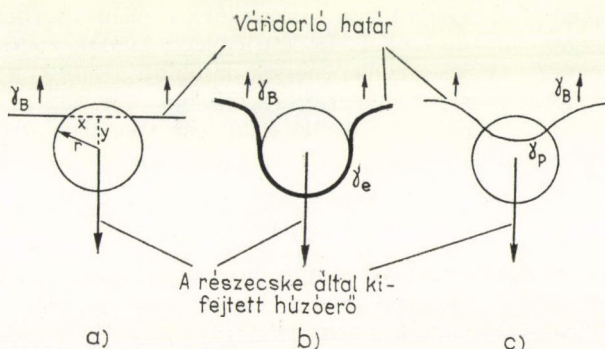
4. FÉKEZŐ ERŐK

A második fázisú részecskék, oldott atomok és felületi bemélyedések hatásai a szemcsehatár-mozgást fékezik. Ezek a fékező erők azonban csak akkor válnak hatásossá, ha van szemcsehatár-mozgás, ezért definíció szerint a (3) egyenletben szereplő összeg mindig pozitív vagy zérus.

4.1. Idegen fázisú részecskék (Zener-fékezés)

Idegen fázisú részecskéknek vagy zárványoknak, ill. pórusoknak fontos szerepük lehet a szemcsehatár-vándorlás akadályozásában. A 3.a. ábra egy r sugarú, gömb alakú részecskét mutat, amelyet egy szemcsehatár metsz át. Ezáltal a πx^2 területen megtakaríthatjuk a γ_B szemcsehatár felületi energiát. Ha nem lép fel hajtóerő, akkor a határ az $y=0$ helyen található, mert ekkor maximális a megtakarítás. Ha azonban valamilyen hajtóerő következtében a határ eltolódik, az átmetszés fékező erőt eredményez. Ha a sík határ területegysége Z számú részecskével érintkezik, akkor ez az erő:

$$p_Z = -Z \frac{d}{dy} (\pi x^2 \gamma_B) = -2Z \gamma_B \pi y. \quad (13)$$



3. ábra. Három mechanizmus, amellyel egy második fázisú részecske kölcsönhatásba lép egy vándorló szemcsehatárral. a) A szemcsehatár „kioltása” gömb alakú részecske által; b) A szemcsehatár beburkolja a részecskét, és γ_e energiájú új határ alakul ki; c) A szemcsehatár áthalad a részecskére és γ_p energiájú új határ alakul ki

Ez a kifejezés $y=r$ esetén éri el maximumát. Ha f a második fázis térfogati hányada, akkor ez utóbbi definíciója alapján:

$$Z = \frac{f}{\pi r^2}, \quad (14)$$

így a maximális fékező erőre a következő kifejezést kapjuk:

$$p_Z = -\frac{2\gamma_B f}{r}. \quad (15)$$

Valójában a szemcsehatár vagy beburkolja a részecskét (3.b. ábra), vagy a koherens részecskén át is halad (3.c. ábra). Ha a megfelelő γ_e vagy γ_p fajlagos felületi energia kicsi γ_B -hez viszonyítva, a (13), illetve (15) egyenlet továbbra is jó becslése a fékező erőnek.

Például, ha $f=1\%$, $r=5 \cdot 10^{-6}$ m és $\gamma_B \cong 2,5 \cdot 10^{-1}$ J/m², akkor $p_Z \cong -10^3$ N/m²

4.2. Oldott atomok

Tegyük fel kiindulásképpen, hogy a (15) egyenlet érvényessége kiterjeszthető arra az esetre is, ha a fékező erők oldott idegen atomoktól származnak. Ebben az esetben f az atomi koncentrációnak és $2r$ az atomátmérőnek tekinthető és durva becslésként fogadjuk el, hogy γ_B értéke az előzőkhöz képest nem változik. Ilyen módon egy atomszázalék oldott szennyező $p_s \cong -(10^7 - 10^8)$ N/m² nagyságrendű fékező erőt eredményezne, ami kvalitatíve elfogadható eredmény. A p_e és p_B hajtó, valamint a p_Z és p_s fékező erők nagyságrendi összehasonlítása azt mutatja, hogy második fázisú részecskék csak a szekunder rekrisztallizációt gátolhatják számottevően, a primer rekrisztallizációt nem, míg az oldott atomok mindkettőt befolyásolják, a tapasztalatokkal egyezésben.

A (15) egyenlet ilyen kiterjesztése azonban nem megengedhető, mivel az idegen atomok (ellentétben a második fázisú részecskékkel) nem rögzítettek a rácsban, hanem diffúzió útján elmozdulhatnak. Ez két lényeges következtetésre vezet:

a) Létezik egy U_B kölcsönhatási energia az oldott atomok és a szemcsehatár között. U_B -t nehéz számolni vagy mérni, a különböző becslések néhány tized eV nagyságrendű értékre vezetnek [8]. Következésképpen az idegen atomok koncentrációja a c_0 átlagkoncentráció fölé növekedhet a szemcsehatárban a következő összefüggés szerint:

$$c = c_0 e^{U_B/kT}. \quad (16)$$

Ez magyarázatot ad arra a kísérleti tényre, hogy még ppm mennyiségekben előforduló szennyezőknek is érezhető hatásuk lehet a rekrisztallizációs folyamatokra. Ennek alapján az oldott atomok hatására fellépő fékező erőre a (15) egyenlet helyett a következő összefüggés állapítható meg [9]:

$$p_s = N_A U_B c_{\text{eff}}(v), \quad (15a)$$

ahol N_A az atomok száma egységnyi térfogatban és $c_{\text{eff}}(v)$ az effektív oldott koncentráció a v sebességgel mozgó szemcsehatárban.

b) Az idegen atomok követik a mozgó szemcsehatárt, ha a közöttük fellépő kölcsönhatás vonzó. Nagyon lassan mozgó határok esetében az oldott atomok mindig közel találhatók egyensúlyi helyzetükhöz és így nem eredményeznek számottevő fékezést. Ez magyarázza, hogy általában az oldott atomok nem gátolják lényegesen a szekunder rekrisztallizációt, bár a primér újrakristályosodást lelassíthatják ugyanabban az ötvözetben. Másrészt, ha a hajtóerők nagyon nagyok (vagy a szennyező koncentráció elegendően kicsiny), a határ maga mögött hagyhatja az oldott atomokat és csaknem akadálytalanul mozoghat tovább a rácsban. Maximális fékező erők így csak a szemcsehatár-mozgás közepes sebességű tartományjaiban alakulhatnak ki. Ennek a folyamatnak a részletei meglehetősen bonyolultak, túlmutatnak a jelen dolgozat egyszerű modelleken alapuló tárgyalásán. A probléma tárgyalásával az irodalomban számos helyen találkozhatunk [8–11] (lásd még 9. fejezet). Most csak arra szeretnénk még rámutatni, hogy a szabad és a kötött határok közötti átmenet az oldott koncentráció mellett a hőmérsékletnek is a függvénye. Következésképpen a rekrisztallizáció hőmérsékletfüggése bonyolult, egyetlen aktiválási energiával általában nem tárgyalható jelenség [9]. Ez magyarázza valószínűleg a rekrisztallizáció „aktiválási energiájára” az irodalomban megadott értékek közötti jelentős eltéréseket még azonos anyagok esetén is.

4.3. Felületi barázdáltság

A termikus maratás folyamán a fém felületén barázda keletkezik ott, ahol a felületet szemcsehatár metszi át. Ilyen barázdát mutat sematikusán a 4. ábra. A bemaródás nyílását az ábrán látható φ szöggel jellemezhetjük. A felületek találkozásának egyensúlyi feltételét a következő összefüggés fejezi ki:

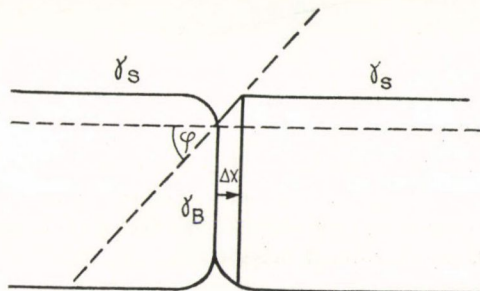
$$\sin \varphi = \frac{\gamma_B}{2\gamma_s}. \quad (17)$$

A szemcsehatár csak úgy mozdulhat ki a barázdából, ha a felülete megnövekszik (4. ábra), ami olyan fékező erőt eredményez, amely γ_B -vel és $\tan \varphi$ -vel arányos. Legyen ezen modellben a minta egy w vastagságú vékony lemez, amelynek teljes keresztmetszetén, a felületre merőlegesen fusson végig a határ. Ekkor a fékezőerő mindkét oldalon jelentkezik és kihasználva, hogy φ kicsi, a fékezőerő így adható meg:

$$p_M \cong \frac{\gamma_B^2}{w\gamma_s}. \quad (18)$$

Megjegyezzük, hogy adott minta esetén p_M kizárólag a szög függvénye és nem függ a barázda mélységétől. Így a barázda már akkor is okozhat fékező erőt, amikor vizuálisan még nem figyelhető meg.

Például, ha $\gamma_s \cong 2\gamma_B = 1 \text{ J/m}^2$ és a lemez vastagsága $0,05 \text{ mm}$, akkor a fékező erőre $p_M \cong -10^4 \text{ N/m}^2$ adódik.



4. ábra. Termikus maratással képződött felületi barázda metszete (a minta mindkét oldalán); a határ Δx elmozdulása a szemcsehatár felületének növekedésével jár

5. A SZEMCSEHATÁR GÖRBÜLET SZEREPE

5.1. Kisméretű szemcsére ható erő

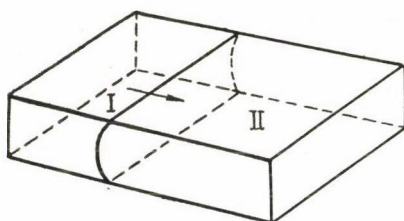
Képzeljünk el egy r sugarú gömb alakú szemcsét, amelyet teljesen körülvesz egy eltérő orientációjú egykristály. A szemcse összehúzódásra törekszik, hiszen így a felületi energia csökken. Ebben az esetben az (1) egyenlet nem alkalmazható, mivel ott a szemcsehatár F felületét állandónak tekintettük, míg most a hajtóerő éppen F megváltozásából származik, és a következőképpen adható meg:

$$p_R = \frac{1}{F} \frac{d(\gamma_B F)}{dr} = \frac{2\gamma_B}{r}. \quad (19)$$

Ez az eredmény bármilyen görbületi szemcsehatár esetén használható, ha r -et az átlagos görbületi sugárnak tekintjük.

5.2. A határgörbület szerepe a tercier rekrisztallizációban

Vizsgáljuk meg most azt, hogyan terjednek át a határ kitüntetett helyein lokalizált hajtóerők a szemcsehatár teljes területére. Tekintsük ismét azt az esetet, amelyben a hajtóerő a szabad felületek energiáinak különbségéből származott (p_F). Az 5. ábrán egy bikristály látható, amelyben az I. szemcsének a felületi energiája alacsonyabb és így a szemcse növekedni képes. A szemcsehatár azonban csak a szabad felület közvetlen közelében „érzi”, hogy a felületi energiák különböznek és így csak ott kezd el mozogni. Ezáltal görbület keletkezik a határon. Amikor a görbület sugara eléri egy kritikus R értéket, a teljes határ ugyanazzal a sebességgel mozog. Egyenlővé téve a p_R és a p_F hajtóerőket, a következő kifejezésre jutunk:



5. ábra. Szemcsehatár görbület tercier rekrisztallizáció folyamán

$$R = \frac{\gamma_B w}{2\Delta\gamma_s}, \quad (20)$$

ahol R a henger alakú határ (5. ábra) egyik fő görbületi sugara, míg a másik fő görbületi sugár ∞ , így a (19) egyenletben szereplő r átlagos sugár értéke $2R$. R mérése felhasználható $\Delta\gamma_s$ meghatározására.

Megjegyezzük, hogy ebben az esetben a $p_R = \gamma_B/R$ hajtóerő nem tekinthető további új hajtóerőnek, amelyet a (3) egyenlet összegzésébe be kellene venni, hanem a p_F hajtóerőt helyettesíti.

5.3. Ék alakú mintában ható erő

Az előzőhöz hasonló helyzet lép fel a 6. ábrán látható esetben is, ahol a minta w vastagságú, ék alakú bikristály. A 6.a. ábrán a határt síknak tételeztük fel, melynek területe:

$$F = wL_0 \left(1 - \frac{x}{L_0} 2 \operatorname{tg} \alpha \right), \quad (21)$$

és amely jobbra tolódik el a

$$p_R = \frac{1}{F} \frac{d(F \cdot \gamma_B)}{dx} = \frac{\gamma_B}{\frac{L}{2 \operatorname{tg} \alpha} - x} \quad (22)$$

hajtóerő hatására. A valóságban a fenti feltevéstől eltérően a szemcsehatár közelítőleg henger alakú, mivel a határ a felületet csak merőlegesen metszheti át (6.b. ábra). A henger valódi sugara

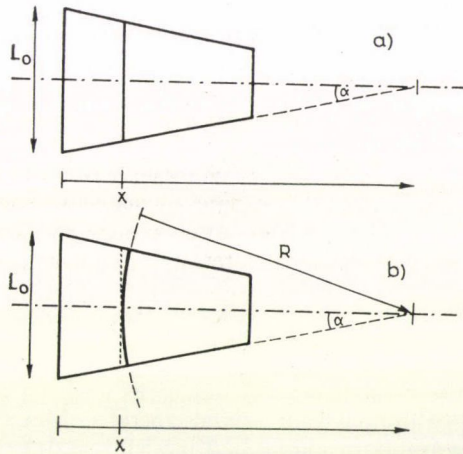
$$R = \frac{L_0}{2 \operatorname{tg} \alpha} - x, \quad (23)$$

míg az átlagos görbületi sugár $r = 2R$, amit a (19) összefüggésbe behelyettesítve:

$$p_R = \frac{\gamma_B}{R}. \quad (24)$$

Ezzel visszakaptuk a (22) egyenletben szereplő hajtóerőt. A határgörbület bevezetése most sem eredményezett további hajtóerőt, hanem csak a hajtóerő „kiterjesztését” jelentette a teljes szemcsehatárra.

Például, ha R néhány cm, akkor ez a hajtóerő 10 N/m^2 nagyságrendű, vagyis kisebb, mint bármely más eddig tárgyalt hajtóerő. Ezért ilyen vizsgálatot nehéz elvégezni.



6. ábra. Hajtóerő egy ék alakú mintában

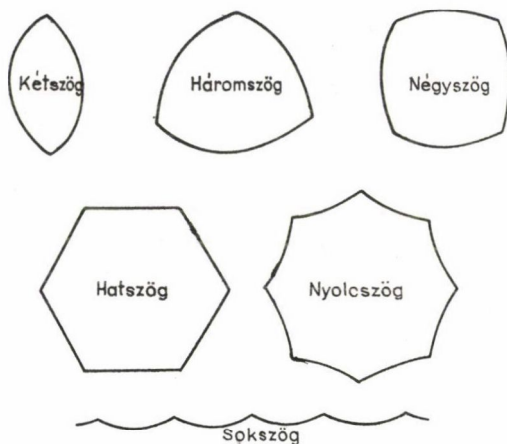
5.4. Folyamatos szemcsenövekedés

A (7) egyenletben szereplő p_B -t a szekunder rekrisztallizáció hajtóerejeként vezettük be. Természetesen ez a folyamatos szemcsenövekedés hajtóereje is. A növekedés sebessége ezért arányos p_B -vel, ami a következő összefüggésre vezet:

$$\frac{dD}{dt} \sim \frac{1}{D} \quad \text{és így:} \quad D \sim \sqrt{t}, \quad (25)$$

ami a jólismert normális szemcsenövekedést írja le.

Az egyes szemcsehatár darabok mindig a saját átlagos görbületi centrumuk irányába mozognak. Ezt a görbületet általában az határozza meg, hogy három határ találkozása egy szemcséélnél akkor van egyensúlyi állapotban, ha 120° -os szöget alkotnak. A 7. ábra két dimenziós példák alapján azt mutatja meg, hogy ez az egyensúlyi feltétel kis szemcsékre (kevés oldallap esetén) konvex, míg nagy szemcsékre



7. ábra. Szemcsehatár görbületek n oldalú, kétdimenziós szemcsékben (az oldallapok találkozási szöge: 120°)

(sok oldallap esetén) konkáv határokat ad, így a nagyobb szemcsék fognak tovább növekedni a kisebbek rovására. Ebben az esetben a szemcsehatár-görbület újra a lokalizált hajtóerőknek a határ teljes területére történő „kiterjesztését” szolgálta.

6. EGYENSÚLY A HAJTÓ- ÉS A FÉKEZŐERŐK KÖZÖTT

Ha a (3) egyenletben található hajtóerők összege zérus, akkor a szemcsehatár nem mozdul el. A követezőkben néhány ilyen esetet vizsgálunk meg.

6.1. Második fázisú részecskék által meghatározott szemcseméret

A folyamatos szemcsenövekedés p_B hajtóereje lecsökken a szemcseméret növekedtével. A szemcsenövekedés teljesen megáll, ha p_B értéke egyenlővé válik a p_Z fékező erővel, amely a második fázisú részecskék hatására lép fel. Felhasználva a (7) és (15) egyenletet, a végső szemcseméretre a következő kifejezés adódik:

$$D_{\max} = \frac{3}{2} \frac{r}{f}. \quad (26)$$

Ennek alapján lehetőség nyílik a gyakorlatban második fázisú részecskék segítségével beállítani kívánt szemcseméretet. Megjegyezzük, hogy a (26) egyenletben szereplő számfaktor különböző modell számítások esetén változik.

6.2. A mintavastagság hatása

A szemcsenövekedés korábban befejeződhet, mint amit a (26) egyenlet megenged, ha a mintának legalább egy mérete kicsi (lemez vagy huzal). Ezt a termikus bema-ródásból származó fékezőerő okozza. A végső szemcseméretet a (7) és (18) egyenlet felhasználásával kapjuk:

$$D_{\max} \cong 6 w, \quad (27)$$

ahol felhasználtuk a $\gamma_s \cong 2\gamma_B$ közelítést.

Ha a szemcseméret összemérhetővé válik a lemez vagy a huzal vastagságával, akkor a (7) egyenlet nem alkalmazható változatlan formában, mert ekkor a szemcsének csak két vagy egy irányban vannak szomszédai. Ha ezt figyelembe véve módosítjuk a (7) egyenletet, akkor a végső szemcseméret:

$$D_{\max} \cong 4 w \quad (28)$$

lemez alakú minták esetén, és

$$D_{\max} \cong 2w \quad (29)$$

huzalok esetén. A kísérleti értékek a fentieknel kissé alacsonyabbak.

6.3. Küszöb deformáció a primér rekrisztallizáció létrejöttéhez

A primér rekrisztallizáció magjai nagyon kicsik. Így a (19) egyenletnek megfelelően összehúzódásra törekszenek, illetve csak akkor kezdenek növekedni, ha p_e nagyobb, mint p_R ((6) és (19) egyenlet). Ennek megvalósulásához a diszlokációs-sűrűségnek el kell érnie egy kritikus értéket:

$$\varrho_{\text{krit}} = \frac{2\gamma_B}{rGb^2}. \quad (30)$$

Például, ha a magok méretét 10^{-6} m nagyságrendűnek tekintjük [12], akkor a fenti kifejezés $\varrho_{\text{krit}} \cong 10^{10}/\text{cm}^2$ diszlokációs-sűrűségre vezet. Ha egy fémbe az alakítás alacsonyabb diszlokáció sűrűséget hoz létre, akkor nem tapasztalunk primer rekrisztallizációt. Ez a rekrisztallizáció más típusaihoz vezet, ahol nem a deformáció okozza a szemcsehatár-mozgást, és ahol sokkal nagyobb szemcsék szolgálnak „magokként”.

7. ÖSSZEFOGLALÁS

Ebben a fejezetben egyszerű modellek alapján áttekintettük azokat a legfontosabb folyamatokat, amelyek nagyszögű szemcsehatárok mozgása révén egy kristály szabad entalpiájának csökkenésére vezetnek. A különböző típusú rekrisztallizációs folyamatok hajtóerejét a szabad entalpia csökkenés mértékének segítségével definiáltuk. Megállapítottuk, hogy a primer rekrisztallizáció hajtóereje az alakított kristályban levő tárolt energiából származik, míg a szekunder rekrisztallizáció hajtóereje a szemcsehatár energiából ered. További hajtóerők vezethetők be a szabad felületek energiája (tercier rekrisztallizáció) és a nemfolytonos precipitáció segítségével. Más hatások a szemcsehatár mozgást gátolják, a rendszer szabad entalpiájának növekedését eredményezik, a határmozgás fékező erőiként működnek. Részletesen tárgyaltuk az idegen fázisú részecskék, az oldott atomok és a felületi barázdáltság hatására fellépő erők legfontosabb jellemzőit. Megvizsgáltuk a szemcsehatár-görbület szerepét, valamint a hajtó- és fékezőerők egyensúlyának feltételeit. Egyensúly esetén, vagyis ha a hajtó- és fékezőerők összege zérus, határmozgás nem megy végbe. Megmutattuk, hogy ennek alapján kívánt szemcseméretű ötvözet állítható elő.

IRODALOM

1. *P. A. Beck*: Phil. Mag. Suppl. 3, 245, 1954.
2. *H. P. Stüwe*: Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner), Dr. Riederer-Verlag GmbH, Stuttgart, 1978. p. 11.
3. *I. Kovács and L. Zsoldos*: Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973. p. 38.
4. *J. L. Walter and C. G. Dunn*: Trans. AIME, 215, 469, 1959.
5. *H. K. Hardy and T. J. Heal*: Progress in Metal Physics, (eds. B. Chalmers and R. King), Pergamon Press, London, 5, 1954. p. 146.
6. *S. Horiuchi and I. Gokyu*: Texturen in Forschung und Praxis, (eds. J. Grewen and G. Wassermann), Springer, Berlin, 1969. p. 312.
7. *Verő J.*: Fémten, Tankönyvkiadó, Budapest, 1969. p. 62.
8. *K. Lücke and H. P. Stüwe*: Recovery and Recrystallization of Metals (ed. L. Himmel), John Wiley and Sons, New York, 1963. p. 171.
9. *K. Lücke and H. P. Stüwe*: Acta Met. 19, 1087, 1971.
10. *J. W. Cahn*: Acta Met. 10, 789, 1962.
11. *Rajkovits Zs. és Kovács I.*: Magyar Fizikai Folyóirat, 24, 45, 1976.
12. *R. D. Doherty*: Metal Sci. J. 8, 132, 1974.

8. PRIMER REKRISZTALLIZÁCIÓ

RAJKOVITS ZSUZSA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	513
2. A primer rekrisztallizáció	514
3. Nukleáció	515
3.1. Vizsgálati módszerek	515
3.2. Nukleációs modellek	516
3.2.1. Klasszikus fluktuációs elmélet	516
3.2.2. A szubszemcsék szerepe a nukleációban	517
3.2.3. Egyéb modellek	524
4. Összefoglalás	525
5. Irodalom	525

1. BEVEZETÉS

A képlékeny alakítás során keletkező rácshibák miatt az alakított fémekben belső feszültségek lépnek fel, a test szabadenergiája nagyobb, mint ugyanezen hőmérsékleten deformáció előtt (5. fejezet). Nem túl magas hőmérsékleteken azonban a deformált állapot mégis stabil marad, mert a termodinamikai hajtóerők a rácshibák mozgását akadályozó hatásokat nem tudják leküzdeni.

A hőmérsékletet növelve azonban bizonyos hibák megszerezhetik a mozgásukhoz szükséges termikus energiát, megindulhat a hibák átrendeződése, megszűnése. Ez a folyamat mechanikai és egyéb tulajdonságok megváltozásával jár együtt.

A legnagyobb aktiválási energiával járó, a diszlokációk eltűnésével kapcsolatos szakasz a rekrisztallizáció. A deformáció tárolt energiájának nagy része ebben a szakaszban szabadul fel.

A rekrisztallizáció általában több, egymástól többé-kevésbé elkülöníthető folyamattal megy végbe. A részfolyamatok során az anyag egyes részeinek kristályorientációja átalakul, deformációmentes kristály jön létre.

A rekrisztallizációt igen sok tényező befolyásolja. A deformáció mértékének, hőmérsékletének és sebességének változásával a fémbe tárolt energia mennyisége változik, s ezzel a rekrisztallizáció hajtóereje (7. fejezet), sebessége stb. jelentősen módosul [1]. Különösen nagy mértékben hatnak a folyamatra a szennyező anyagok. Már igen kis koncentrációban jelenlevő szennyező (1 ppm) is jelentősen növelheti a rekrisztallizáció hőmérsékletét (9. fejezet) [2]. A szennyező anyagi minőségétől függően különböző módon változik a rekrisztallizáció hőmérséklete. Megállapították, hogy a rekrisztallizációs hőmérséklet különösen olyan szennyezők esetén nő, amelyeknek diffúziós aktiválási energiája viszonylag nagy [3].

A szennyezők hatása aszerint is eltérő, hogy szilárd oldatban, vagy kiválások formájában vannak-e a mátrixban [1].

A jelen dolgozatban csak nagytisztaságú, hidegen alakított anyagok rekrisztallizációjával foglalkozunk, elsősorban a nukleációs mechanizmusok természetére vonatkozóan.

2. A PRIMER REKRISZTALLIZÁCIÓ

A primer rekrisztallizáció két részfolyamat együttesét jelenti. Az egyik részfolyamatban növekedésre képes magok (nukleusok) keletkeznek a deformált szerkezetben. A második részfolyamatban ezen magok növekedésével tűnik el a deformált szerkezet. Mindkét részfolyamat termikus aktiválással megy végbe.

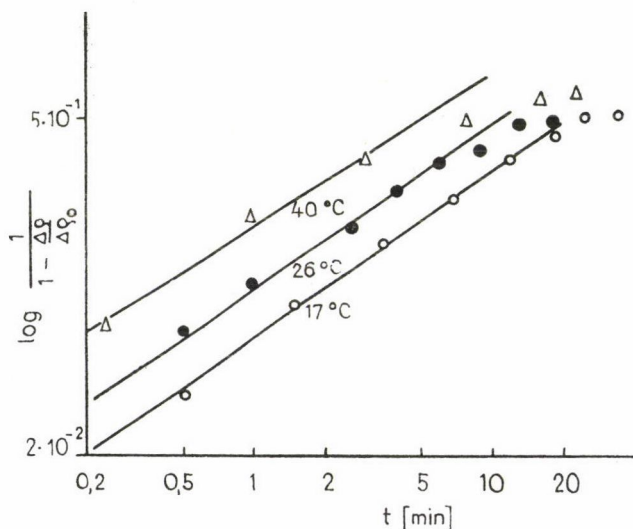
A primer rekrisztallizáció folyamatát leíró kinetikát elméletileg is meghatározhatjuk. Mint minden nukleációval és növekedéssel lejáró folyamatot (pl. kristályosodás, precipitáció stb.) a primer rekrisztallizációt is az

$$X = 1 - \exp(-Bt)^n \quad (1)$$

alakú, Avrami típusú egyenlettel írhatjuk le, ahol X a t idő alatt rekrisztallizált szemcsék relatív hányada, n és B kísérletileg meghatározható állandók. A folyamat hőmérsékletfüggését a

$$B = B_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (2)$$

összefüggés határozza meg, ahol Q a folyamat aktiválási energiája [5]. A B és n



1. ábra. Csavarással deformált kis mennyiségű különböző szennyezőket tartalmazó Al minták elektromos ellenállás változás mérésével felvett primer rekrisztallizációs görbéi [2]

paraméterek kísérleti adatokból történő meghatározását az 1. ábrán szemléltettük.

A primer rekrisztallizáció kinetikáját leggyakrabban mechanikai paraméterek (keménység, folyáshatár stb.), illetve elektromos ellenállás nyomonkövetésével szokták vizsgálni [4].

3. NUKLEÁCIÓ

A rekrisztallizáció tanulmányozása gyakorlati szempontból is igen jelentős. Az alakított és hőkezelt anyagok végső szemcse szerkezete, átlagos szemcsemérete, a szemcsék alakja, végső orientációja a rekrisztallizáció folyamatában alakul ki. A rekrisztallizáció két részfolyamata közül különösen a nukleáció van nagy hatással az anyag végső tulajdonságaira. A nukleációs folyamat felderítésére ezért már viszonylag hosszú idő óta igen kiterjedt vizsgálatok folynak. A kutatások során jelentős mennyiségű kísérleti eredmény gyűlt össze, melyek értelmezésére több nukleációs modell született.

A nukleációs modellek ismertetése előtt áttekintjük a leggyakrabban alkalmazott vizsgálati módszereket.

3.1. Vizsgálati módszerek

A nukleáció heterogén jelenség, ezért a nukleációs helyek felderítése szempontjából szükséges ismernünk a deformált anyag szerkezetét. A nukleáció vizsgálatához *közvetett* és *közvetlen* megfigyelési módszerek állnak rendelkezésre.

Közvetett módszerek

Az optikai mikroszkópia mellett, a részben rekrisztallizált anyagból készült metszetek transzmissziós elektronmikroszkópos (TEM) vizsgálata különösen a nukleációs mechanizmus megismerése szempontjából fontos. A rekrisztallizált szemcse orientáció viszonyait a röntgen diffrakció mellett, kis területek elektrondiffrakciós vizsgálatával is meghatározhatjuk. Az orientáció meghatározásához használt Kossel röntgen diffrakciós technikát jelenleg jól kiegészíti az alapjaiban hasonló Kikuchi elektrondiffrakciós vizsgálat [4].

Közvetlen módszerek

A nukleáció mechanizmusának teljes megismeréséhez elengedhetetlenek a direkt, „in situ” vizsgálatok. A TEM módszer a speciális, fóliászerű minta felhasználása miatt „in situ” vizsgálatokra nem alkalmas. Megállapították ugyanis, hogy csak egy bizonyos mintavastagság esetén játszódik le rekrisztallizáció az anyagban. A vékony mintákban azonban a felületi hatások lényegesen megváltoztatják a rekrisztallizáció lefolyását (7. fejezet).

Sandström és munkatársai szerint egy kritikus méretnél vastagabb fólia szükséges ahhoz, hogy a vizsgált rekrisztallizációs folyamat a kiterjedt anyagban leját-

szódó folyamathoz hasonló legyen [5]. Ilyen vastag minta átvilágításához már nagyfeszültségű elektronmikroszkópra (HVEM) van szükség. Az utóbbi években a HVEM alkalmazása újra fellendítette a nukleáció mechanizmusának „in situ” tanulmányozását [6].

3.2. Nukleációs modellek

A deformált anyagban a nukleációs helyeket az anyag mikroszerkezete határozza meg. Egy polikristályos anyag alakítása során a kiindulási szemcsealak a deformáció jellegétől függően torzul. Kialakulhatnak a mintában olyan kicsiny tartományok is, amelyeken belül az orientáció jelentősen különböző. Ezeket a tartományokat deformációs sávoknak nevezzük. A torzult szemcsék határain, valamint a deformációs sávok környezetében lokálisan igen nagy deformációk fordulhatnak elő, ezért a nukleáció valószínűsége ezen tartományokban a legnagyobb.

A nukleációs modellek mindegyikében figyelembe kellett venni a következő, már régen ismert kísérleti tapasztalatokat:

- a) Növekedésre képes szemcsék (nukleusok) azokon a helyeken képződnek, ahol a deformáció mértéke lokálisan nagyobb.
- b) Az alakítás mértékét egy kritikus alakításon túl növelve, a nukleációs helyek száma növekszik.
- c) A nukleusok orientációja nem független azon részek orientációjától, amelyekben kialakultak [4].

A nukleációs modelleket általában az alábbi öt csoportba sorolhatjuk:

1. Klasszikus fluktuációs elmélet.
2. Poligonizációs modell.
3. Szubszemcse-illeszkedésre épülő modellek.
4. Kihajlásos mechanizmussal (strain induced boundary migration, bulge-nucleation) végbemenő nukleáció.
5. Egyéb nukleációs modellek.

A következőkben részletesen elemezzük az említett nukleációs modelleket.

3.2.1. Klasszikus fluktuációs elmélet

A homogén nukleációs modell szerint a nukleusok véletlenszerűen, a termikus fluktuációk következményeként keletkeznek [7]. Az anyag térfogategységében tárolt deformációs energia csökkenése fedezi a nukleus és a deformált mátrix között keletkező határfelület energiáját. Gömb alakot feltételezve a növekedésre képes mag méretét az

$$r = \frac{2\sigma}{E} \quad (3)$$

összefüggéssel adhatjuk meg, ahol r a kritikus méret, σ a fajlagos határfelületi energia, E a tárolt deformációs energiasűrűség. A hidegalakítás során a fémekben tárolt energia és a mért határfelületi energia adatok ismeretében számított kritikus magméret az $E=10^4 \text{ J/m}^3$ és $\sigma=0,5 \text{ J/m}^2$ adatokkal 10^{-6} m -nek adódik. Termikus fluktuációval azonban ilyen nagyméretű magok nem jöhetnek létre. Ezért a homogén nukleáció lehetőségét el kell vetnünk [8].

Végbemeget viszont a nukleáció heterogén módon, ha találhatók a deformált szemcsék határai mentén speciális, lencse alakú képződmények (2. ábra), melyek már nagyszögű szemcsehatárokkal rendelkeznek [4]. Az ilyen képződmények jelenléte a nukleus képződéséhez szükséges energiát jelentősen lecsökkenti.

3.2.2. A szubszemcsék szerepe a nukleációban

A 2., 3. és 4. modellek közös vonása, hogy a nukleáció nem az eredetitől eltérő orientációjú részecske képződésével történik, hanem már a deformált, vagy a rekrisztallizációt megelőző megújulási folyamatok során kialakult szerkezet is tartalmazza a nukleust. A megújulási folyamatokban, mint ismeretes, kisszögű szemcsehatárokkal rendelkező tartományok, ún. szubszemcsék alakulnak ki. A poligonizációs modell a nukleációkor keletkező feszültségmentes tartományokat a poligonizációs folyamattal kialakult szubszemcsékkel azonosítja [9, 10].

A rekrisztallizációt gyakran olyan diszlokáció átrendeződés előzi meg, melynek során a diszlokációk feszültségterei egymást átfedik, a diszlokációk falakba rendeződnek. Cottrell szerint a szubszemcsehatárok kezdeti kis mozgékonyasága magyarázza a rekrisztallizáció kezdeti lassú szakaszát. A folyamat során egyre nő a határ mentén az orientációkülönbség, így megnő a határ mozgékonyasága is, a rekrisztallizációs folyamat tehát felgyorsul [11]. Az elmélet a primer rekrisztallizáció kinetikáját leíró szigmoid típusú görbével jó összhangban van.

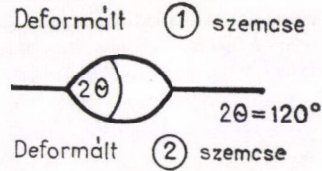
Beck megállapította, hogy az a szubszemcse, amelyik növekedni képes, méretelőnnyel rendelkezik az öt körülvevő szubszemcsékhez képest. A nukleussá válás folyamatában a szubszemcse kismozgékonyaságú, kisszögű szemcsehatára a nukleust jellemző nagyszögű szemcsehatárrá alakul [12].

A nukleus és a szubszemcse orientációviszonyaira Bellier és Doherty azt találták, hogy a nukleus orientációja megegyezik azon szubszemcse orientációjával, amely az öt körülvevő deformált anyagba növekedett [13].

A szubszemcsékre épülő különböző nukleációs modellek abban különböznek egymástól, hogy milyen mechanizmust jelölnek meg a szubszemcsék méretelőnyének kialakulására és a szubhatár nagyobb mozgékonyaságára vonatkozóan.

A nukleussá váláshoz szükséges tulajdonságok kétféle módon alakulhatnak ki. Az egyik esetben a szubszemcse a határának mozgásával nő a kívánt méretűre, míg a másik esetben néhány szomszédos szubszemcse kis orientációkülönbsége rotációval történő szubszemcse-illeszkedéssel (coalescence) megszűnik. A szubszemcse-illeszkedés modellje Hu nevéhez fűződik, a folyamat kinetikáját és termodinamikáját Li dolgozta ki [14, 15]. Az elmélet szerint szubszemcse-illeszkedéssel olyan szubszemcsék nőhetnek, amelyek határa csavardiszlokációkat tartalmazó „twist” határ. Ekkor ugyanis a szubszemcsék közötti határ egy bizonyos irány körüli elforgatással feloldódhat. A folyamat időigénye kisebb a szemcsehatár mozgással lejártszódó folyamatokénál.

A szubszemcsék szerepét a rekrisztallizációban számos esetben kísérletileg is kimutatták [4]. Mind a szubszemcsenövekedés, mind a szubszemcse-illeszkedés

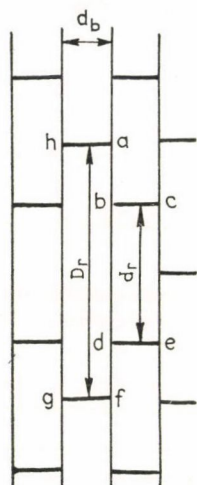


2. ábra. A heterogén nukleáció feltétele

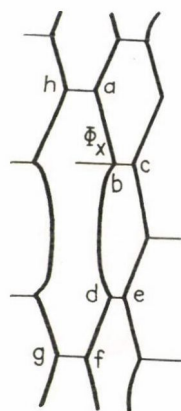
kísérleti úton is megfigyelt folyamat. Általában megállapíthatjuk, hogy a deformáció típusától és mértékétől függ a szubszemcsék szerepe a rekrisztallizációs folyamatban.

Rekrisztallizációs nukleusok többnyire a nagy lokális deformációjú helyek (deformációs sávok, nagyszögű szemcsehatárok) környezetében található szubszemcsékből alakulnak ki.

A deformációs sávban levő szubszemcse, mint rekrisztallizációs mag esetére Dillamore és munkatársai végeztek részletes elemzést [16]. A 3. ábrán a deformációs sáv sematikus képe látható. Az ábrán a függőleges határok az ún. geometriailag szükséges diszlokációkból álló, dőlt határok. A vízszintes határok ún. véletlen határok. Az ábrában d_r és d_v a véletlen, illetve a dőlt határok átlagos távolságát, míg D_r az átlagosnál nagyobb szubszemcse átmérőjét jelenti. Hőkezelés hatására, még a rekrisztallizációt megelőzően, a szubszemcse határokon a határfelületi energiák által meghatározott görbület alakul ki (4. ábra). A hőkezelés során ezek a határok



3. ábra. Deformációs sáv sematikus rajza



4. ábra. Megújult deformációs sáv sematikus képe

mozoghatnak. Pl. a 4. ábrán látható $a-b$ határ addig mozog, amíg a b határtalálkozási pont a c pontot el nem éri.

A vízszintes és függőleges határok fajlagos felületi energiája az eltérő orientációkülönbségek miatt különböző. (A függőleges határok orientációkülönbsége nagyobb.) Ennek alapján a b határtalálkozási pontban, a határfelületi energiák által meghatározott egyensúlyi állapotban, a φ szögre a

$$\cos \varphi = \frac{\sigma_r}{2\sigma_t} \quad (4)$$

összefüggés adódik, ahol σ_r a vízszintes, σ_t a függőleges szubhatárok fajlagos felületi energiája.

A nagy szubszemcse akkor válhat rekrisztallizációs nukleussá, ha az egyensúlyi állapotot jellemző φ szög kialakulása előtt eléri a b pont a c határtalálko-

zási pontot. Részletes elemzés alapján ez abban az esetben teljesül, ha a nagy szubszemcse D_r méretére fennáll a

$$D_r > \frac{4}{3} \left\{ d_r + d_t \left| \frac{4\sigma_t^2}{\sigma_r^2} - 1 \right|^{1/2} \right\} \quad (5)$$

összefüggés, vagyis a szubszemcse keskeny, függőleges irányban eléggé elnyúlt [16].

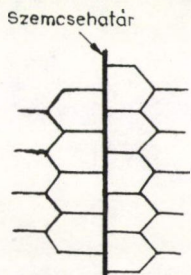
A deformációs sávban az átlagosnál nagyobb méretű szubszemcse kialakulhat szubszemcse-illeszkedéssel is [14].

A nukleáció jelensége gyakran megfigyelhető a deformált mátrixban eredetileg meglevő nagyszögű szemcsehatárok közvetlen környezetében is. A diszlokációk a nagyszögű szemcsehatár környezetében kisebb energiával rendelkeznek, mint a szemcse belsejében, ez adja a folyamat hajtóerejét. Egy alakítás utáni szerkezetet mutat sematikusan az 5. ábra. Megújulásakor a határfelületi energiáknak megfelelően a 6. ábrán látható szerkezet alakul ki, a nagyszögű szemcsehatáron görbületeket figyelhetünk meg, míg a nagyszögű szemcsehatár két oldalán elhelyezkedő szemcsékben a megújulás során szubszemcse szerkezet jöhet létre.

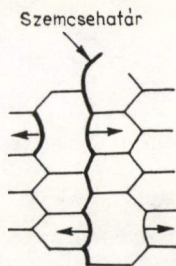
Kísérleti adatok alapján megállapítható, hogy a nagyszögű szemcsehatárok környezetére a következők jellemzők.

- a) A szomszédos szemcsékben található, kisszögű határokból levő diszlokációk a nagyszögű szemcsehatár diszlokációin keresztül fokozatosan összekapcsolódnak.
- b) A megújulás alatt a szubszemcsehatár diszlokációi és a szemcsehatár diszlokációk átrendeződnek.
- c) A szemcsehatár környezetében kialakulhatnak nagy szubszemcsék.
- d) A legtöbb megfigyelt nukleációs esemény a nagy szubszemcsék jelenlétével kapcsolatos.

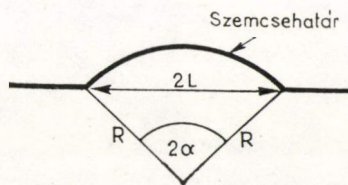
Az első modell, mely a nagyszögű szemcsehatárok környezetében lejátszódó nukleációra született, a kihajlásos modell volt (strain induced boundary migration). Az elméleti kidolgozása Beck és Sperry nevéhez fűződik [17]. Kísérletileg elektronmikroszkópos megfigyelés alapján Bailey és Hirsch vizsgálta [18]. A modell arra a feltételezésre épül, hogy a hidegen alakított anyagban két szomszédos szemcsében a tárolt energiasűrűség alapvetően különböző lehet. A szemcséket elválasztó határ a nagyobb energiasűrűségű szemcse felé kihajlik, rajta görbület alakul ki (7. ábra).



5. ábra. Nagyszögű szemcsehatár környezete alakítás után (sematikusan)



6. ábra. Nagyszögű szemcsehatár környezetében megújult szerkezet sematikusan



7. ábra. Kihajlásos modell

A kihajlás növekedésének feltétele a

$$\left(E - \sigma \frac{dA}{dV}\right) > 0 \quad (6)$$

összefüggéssel adható meg, ahol E a tárolt energiasűrűség-különbség, σ a fajlagos határfelületi energia, A a felületet, V a térfogatot jelenti. A növekedni képes mag méretére a 7. ábra és a (6) kifejezés alapján az

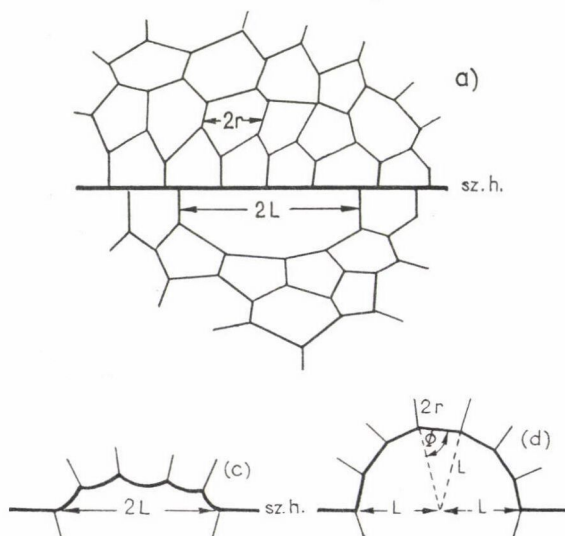
$$L \equiv \frac{2\sigma}{E \sin \alpha} \quad (7)$$

kifejezés adódik.

Amennyiben a nagyszögű határ környezetében a (7) kifejezés szerint megadott méretű szubszemcse található, az rekrisztallizációs maggá válhat. *Doherty és Cahn* a fenti modellt továbbfejlesztve megállapították, hogy a tárolt energiasűrűség-különbség a hőkezelés alatt keletkező szubszemcse szerkezettel kapcsolatos [19]. Ekkor alakulnak ki ugyanis a szemcsehatár közvetlen környezetében a nagyobb méretű szubszemcsék, a potenciális rekrisztallizációs nukleusok.

A kihajlásos nukleációs modellben a szubszemcsék szerepét a következő gondolatmenet alapján világítjuk meg. A nagyszögű szemcsehatár környezetében már a polygonizált szerkezetben is előfordulhatnak nagy méretű szubszemcsék. Mint már említettük, a nagyszögű szemcsehatáron görbületek alakulnak ki, melyek a 8. ábrán látható módon kapcsolatosak a szubszemcse szerkezettel. Félgömb alakú kihajlás feltételezve, a 8.b. ábrán alkalmazott jelöléssel a kritikus nukleus méretére az alábbi kifejezés adódik:

$$L = \frac{r}{\cos \phi} = \frac{2r\sigma_g}{\sigma_s} \quad (8)$$



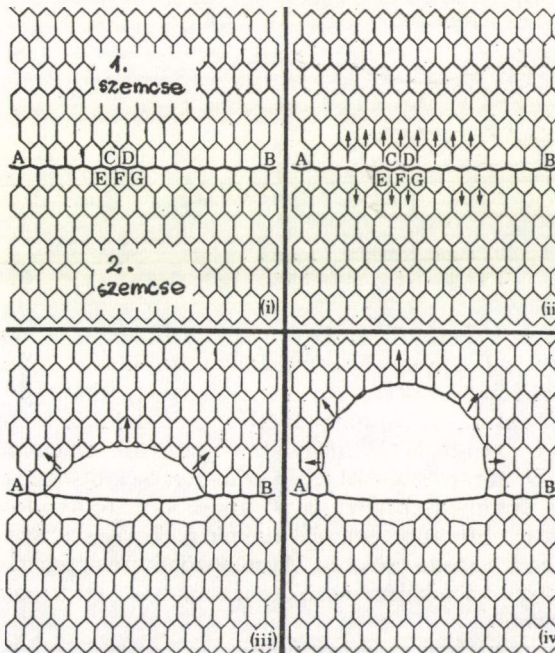
8. ábra. Szubszerkezet nagyszögű szemcsehatár környezetében
a) alakítás után és b) megújulás után

ahol r az átlagos szubszemcse-méret. A (8) összefüggésből az is látható, hogy az $L=2r$ a csak szemcséket, vagy csak szubszemcséket tartalmazó szerkezetben ($\sigma_g = \sigma_g$) lehet a növekedésre képes nukleus mérete.

Kísérleti tény, hogy kihajlásos mechanizmussal lejátszódó nukleáció egy bizonyos mértékű alakítás felett nem figyelhető meg [11]. A fenti modell alapján ezt a megfigyelést is értelmezni tudjuk. Ugyanis a szubszemcse fajlagos határfelületi energiája az orientáció függvénye. A szubszemcsék orientációkülönbségét viszont az alakítás mértéke is befolyásolja. Ismerve a σ_s és σ_g értékét, valamint a szubszemcseméretet, a (8) összefüggés alapján megadhatjuk a kritikus magméretet. Pl. nagytisztaságú Al esetén, 40%-os összenyomás után az orientációkülönbség kb. 3° , és a $\sigma_g/\sigma_s \approx 3$. A mért $2r = 1,7 \mu\text{m}$ átlagos szubszemcseméret mellett a kihajlás kritikus méretére a (8) összefüggés alapján $2L = 7 \mu\text{m}$ adódik, azaz a $7 \mu\text{m}$ -nél nagyobb kihajlásokból lesz rekrisztallizációs mag. Növelve az alakítás mértékét, az átlagos szubszemcseméret csökken, és ezzel együtt a kialakuló kihajlások mérete is. Ezért nagy deformációk esetén a kihajlások, kis méretük miatt, nem válhatnak nukleussá [20].

A szubszemcse-illeszkedéssel mechanizmusra vonatkozó számos modell közül Jones és munkatársai modelljét ismertettük [21] Feltevéseik a következők:

A 9 ábrán vázolt nagyszögű szemcses határ két oldalán levő 1 és 2-vel jelölt szemcsék diszlokációeloszlása hasonló, közel azonos méretű szubszemcsék alakulnak ki mindkét szemcsében. Minden szubszemcses határ felületi energiája azonos.

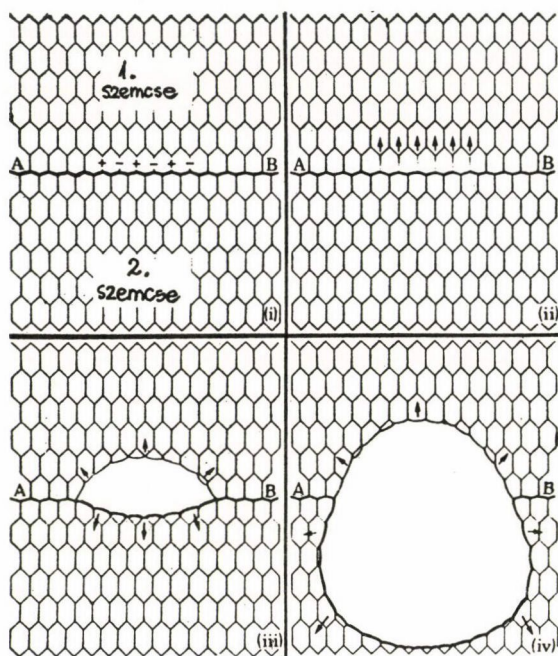


9. ábra. Kihajlás kialakulása szubszemcses határ illeszkedéssel

A nagyszögű határon kialakult görbületeket és éleket a szomszédos szubszemcsék alakítják ki.

A szomszédos szubszemcsék jellegét tekintve két esetet különböztethetünk meg.

- Teljesen azonos szubszemcse-határok torkollanak a nagyszögű határba (9. ábra).
- Ellenkező előjelű diszlokációkból felépült szubszemcse-határok metszik a nagyszögű szemcsehatárt (10. ábra).



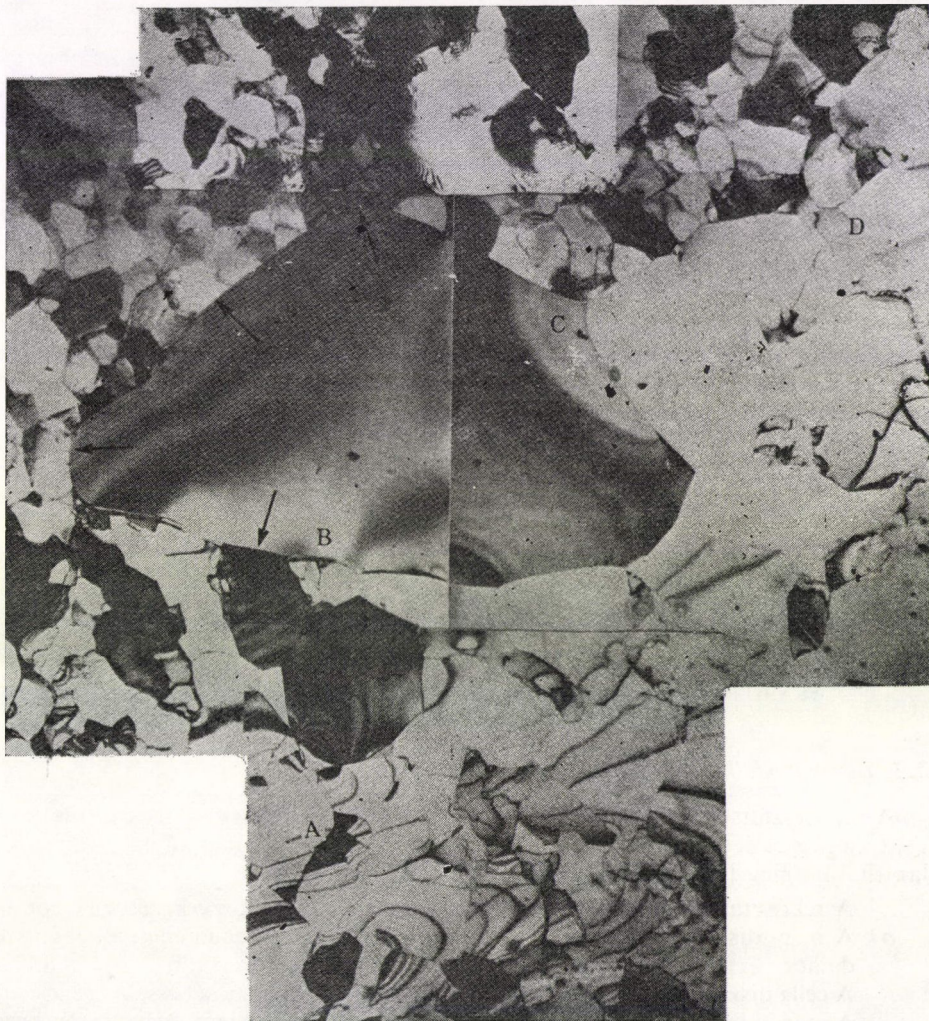
10. ábra. Kihajlás kialakulása ellenkező előjelű diszlokációkat tartalmazó szubszerkezet esetén

Az *a)* esetben a 9. ábrán **C** és **D**-vel jelölt szubszemcse rotációval illeszkedik egymáshoz, miközben a nagyszögű szemcsehatár szubszemcsével érintkező darabján is módosul a diszlokációelrendezés. A mátrix- és szemcsehatár-diszlokációk további zavartalan kapcsolódásához ezen határdarab rácsdiszlokáció elrendezése is megváltozik. A nagyszögű szemcsehatár megváltozott diszlokációelrendeződése a 2. jelű szemcsében levő, a 9. ábrán EFG-vel jelölt szubszemcsék diszlokáció-eloszlását megváltoztatja. Ennek eredményeképpen a 9. ábrán látható módon, a szemcsehatár mindkét oldalán nagyobb szubszemcsék alakulnak ki. A szubszemcse-illeszkedéssel a diszlokációsűrűség lokálisan csökken. A nagyszögű szemcsehatár mindkét oldalán kialakuló lokális diszlokációsűrűség-csökkenés miatt a szemcsehatár egyik szemcse belseje felé sem görbül.

A *b)* esetben a nukleáció az előzőtől eltérő mikroszerkezeti változásra épül.

Az ellenkező jellegű szubszemcsehatárok illeszkedése ugyanis a nagyszögű szemcsehatárban kisebb átrendezést követel meg, ezért a 2. szemcsében levő szub-

szemcse szerkezet sem változik jelentősen a nagyszögű szemcsehatár mentén. Ennek következtében csak az 1 szemcsében alakul ki nagyobb szubszemcse (10. ábra). A nagyobb szubszemcsét körülvevő határ egyik részét a nagyszögű szemcsehatár adja. A nagy szubszemcse mérete részben kisszögű, részben nagyszögű szemcsehatár-mozgással változhat. A kétféle határ mozgékonyságának különbsége határozza meg a nukleus morfológiáját. A nagyszögű szemcsehatár nagyobb mozgékonysága miatt a 2 szemcsében a 9. ábrán látható nukleus alak alakul ki. A kisszögű szemcsehatár mozgása során folyamatosan nagyszögűvé alakul.

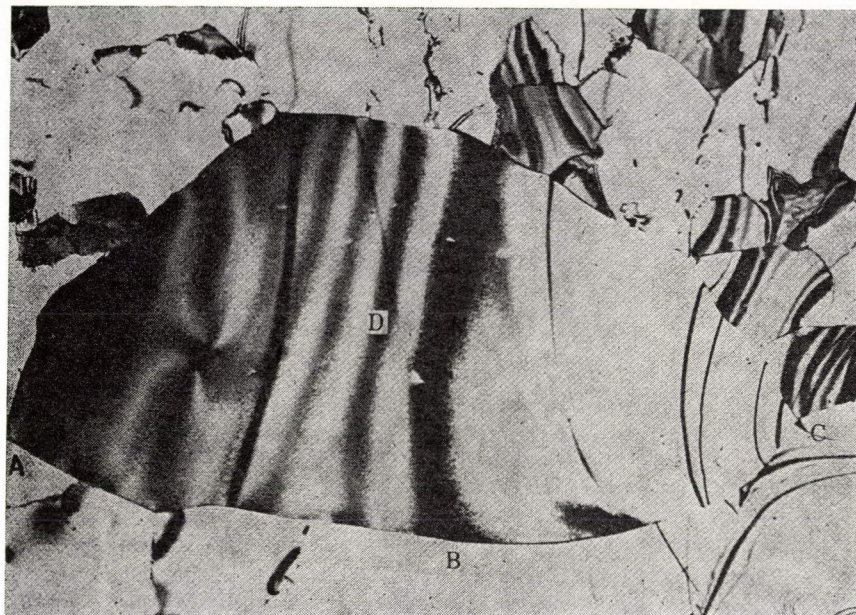


11. ábra. Elektronmikroszkópos felvétel a 10. ábrán vázolt mechanizmusra. A nukleus (BCD) határa nagyszögű szemcsehatár, míg a nyíllal jelölt részek kisszögű szemcsehatárok

A valóságos mikroszerkezetben a nagyszögű szemcsehatárok környezetében általában bonyolultabb szubszemcseszerkezet alakul ki, ennek megfelelően bonyolultabb nukleus elrendezés valósul meg. A rekrisztallizációs szerkezet kialakulása azonban alapvetően ilyenkor is a fenti két eset törvényszerűségei alapján értelmezhető.

A kihajlással történő nukleációra példaként hengerelt Al-on végzett elektronmikroszkópos megfigyelések eredménye látható a 11. és 12. ábrákon. A 11. ábra az *a)*, míg a 12. ábra a *b)* esettel kapcsolatos nukleációs mechanizmusra példa.

Végül megemlítjük, hogy szubszemcse-illeszkedés nemcsak szemcsehatárok környezetében, hanem a szemcsék belsejében is lejátszódhat [22].



12. ábra. Elektronmikroszkópos felvétel a 9. ábrán vázolt mechanizmusra. Az ABC nagyszögű szemcsehatár környezetében levő D nagy szubszemcse a rekrisztallizációs nukleus

3.2.3. Egyéb modellek

A nagyfeszültségű elektronmikroszkópia alkalmazása lehetővé tette a nukleáció direkt megfigyelését. Ray és munkatársai HVEM eredményei alapján a következőket állapíthatjuk meg [23].

- a)* A rekrisztallizáció nukleációs helyei már a deformált szerkezetben adóttak.
- b)* A nagy diszlokációsűrűségű deformációs sáv környezetében levő, szomszédaihoz képest hosszú, keskeny cellából lesz rekrisztallizációs nukleus. A cella diszlokáció szerkezete változik, határa igen nagy sebességre tesz szert.
- c)* A mozgó határ igen rövid idő alatt éri el a nagy sebességét. A határ szerkezetének ez a martenzites átalakuláshoz hasonló, gyors változása alapvető fontosságú a nukleussá válás szempontjából.

- d) Katalizált nukleáció jelensége is megfigyelhető az „in situ” vizsgálattal. Ez azt jelenti, hogy a szemcsehatár mozgása során a mátrixban új, növekedésre képes szemcsék választódhatnak ki. A megújult szerkezetekben a szubszemcsehatár-mozgás ugyanis kollektív diszlokációmozgás. A mozgás során a szemcse alakja torzulhat, amely torzulás olyan feszültség létrejöttét eredményezi, amely a szubszemcsehatár mozgását megszünteti. Amennyiben megszabadul a határ ettől a feszültségtől, úgy ismét növekedhet a szubszemcse. A nagyszögű szemcsehatár a benne lejátszódó csúszási folyamatok következtében megszabadíthatja az említett szubhatárt a feszültségtől, ilyen módon katalizálhat nukleációt [23].

További HVEM és egyéb metallográfiai megfigyelések még eddig ismeretlen jelenségeket és részleteket tárhatnak fel, amelyek segítségével a fenti nukleációs modellek kiegészíthetők, finomíthatók.

4. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban nagy tisztaságú, hidegen alakított anyagok primer rekrisztallizációjában alapvetően fontos nukleáció jelenségét tekintettük át. A lehetséges nukleációs modelleket összefoglalva részletesen foglalkoztunk a szubszemcsék szerepével a nukleációs folyamatokban.

IRODALOM

1. Rajkovits Zs. és Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 24, 45, 1976.
2. E. Kovács-Csetényi and I. Kovács: Realstruktur und Eigenschaften von Reinstoffen, Akademisch-Verlag, Berlin, 1967. p. 709.
3. Kovács-Csetényi E., Kandidátusi értekezés 1974.
4. R. D. Doherty: Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner), Riederer-Verlag, Stuttgart, 1978. p. 23.
5. R. Sandström, B. Lehtinen and R. Lagneborg, Scan. Inst. Met. 4, 17, 1975.
6. Rajkovits Zs., Magyar Fizikai Folyóirat, 26, 553, 1978.
7. J. E. Burke and D. Turnbull, Progr. Met. Phys. 3, 220, 1952.
8. J. W. Christian: The Theory of Transformation in Metals and Alloys, Pergamon Press, Oxford, 1965. p. 410.
9. R. W. Cahn, Proc. Roy. Soc. 63A, 323, 1950.
10. P. A. Beck, I. C. Kremer, L. J. Demer and M. L. Holtzworth, Trans. AIME 175, 372, 1948.
11. A. H. Cottrell, Progr. Met. Phys. 4, 255, 1953.
12. P. A. Beck, Phil. Mag. 3, 245, 1954.
13. P. Bellier and R. D. Doherty, Acta Met. 25, 521, 1977.
14. H. Hu: Recovery and Recrystallization of metals, (ed. L. Himmel), Interscience, New York 1963. p. 311.
15. J. C. M. Li, J. Appl. Phys. 33, 958, 1963.
16. I. L. Dillamore, P. L. Morris, C. I. Smithard, W. B. Hutchinson, Proc. Roy. Soc. 329A, 405, 1972.
17. P. A. Beck and P. R. Sperry, J. Appl. Phys. 21, 150, 1950.
18. I. E. Bailey and P. B. Hirsch, Proc. Roy. Soc. A267, 11, 1962.
29. R. D. Doherty and R. W. Cahn, J. Less-Common Metals, 28, 279, 1972.
20. P. Faivre and R. D. Doherty, J. Mat. Sci. 14, 897, 1979.
21. A. R. Jones, B. Ralph and N. Hansen, Proc. Roy. Soc. London 368, 345, 1979.
22. H. Fujita, J. Phys. Soc. Japan, 16, 804, 1961.
23. R. K. Ray, W. B. Hutchinson and B. I. Duggan, Acta Met. 23, 831, 1975.

9. KISMENNYISÉGŰ ADALÉKOK HATÁSA A MEGÚJULÁSRA ÉS REKRISZTALLIZÁCIÓRA

KOVÁCSNÉ CSETÉNYI ERZSÉBET

ALUTERV—FKI

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	527
2. Elméleti áttekintés	528
3. Kísérleti eredmények	530
4. Összefoglalás	534
5. Irodalom	535

1. BEVEZETÉS

Régóta ismert, a gyakorlatban is alkalmazott eljárás a mikroötvözők, kismennyiségű adalékelemek felhasználása a fémek hőállóságának a javítására. A hatásmechanizmus tisztázására irányuló vizsgálatokra azonban csak a nagy tisztaságú fémek előállítása után kerülhetett sor. Ekkor vált ugyanis lehetővé olyan jól definiált összetételű, kétalkotós ötvözetsorok előállítása, amelyek az egyes adalékelemeket egyre növekvő mennyiségben, szilárd oldat formájában tartalmazzák [1, 2]. Ezáltal az oldott atomoknak az alakított és újrakristályosodott mátrixot elválasztó határfelületre kifejtett hatása tanulmányozhatóvá vált.

A különböző adalékok eltérő mértékben késleltetik az újrakristályosodási folyamatot, vagyis azonos kiindulási feltételek esetén, pl. azonos mértékű hidegalakítás után adott hőmérsékleten bizonyos szennyezők jelenlétében csak hosszabb idő után, vagy egyáltalán nem történik újrakristályosodás. A különböző adalékok, szennyezők hatásának összehasonlítására célszerű meghatározott idejű izokron hőkezelést alkalmazni az izoterm vizsgálatok helyett. Ehhez azonban az szükséges, hogy a kezdeti feltételek, mint pl. az alakítás módja és mértéke, valamint az orientáció viszonyok valamennyi ötvözetre azonosak legyenek [3].

A kétalkotós ötvözeten kapott eredmények technikai tisztaságú anyagokra való alkalmazhatósága további problémát jelent. A gyakorlat ugyanis erre vonatkozó ismereteket igényel az új gyártástechnológiák kialakításához. Ma még a nagy tisztaságú fémekre meghatározott adalékhatások gyakorlati átültetése számos nehézségbe ütközik.

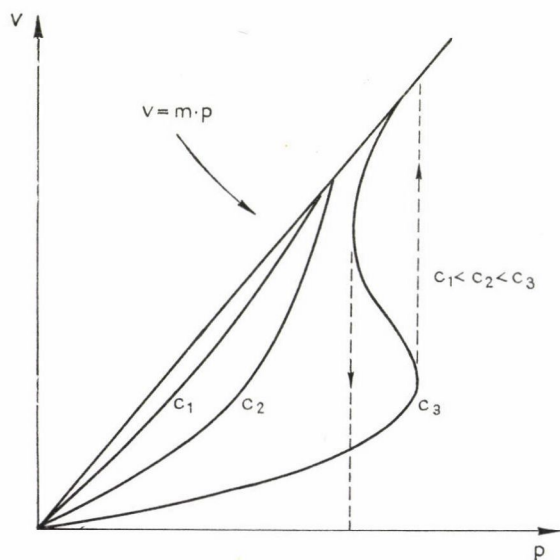
Néhány példán bemutatjuk azokat a körülményeket, amelyek miatt az adalékok egyedi hatása technikai tisztaságú fémekben csökken. Ilyen pl. a vizsgált mikroötvöző szilárd oldhatóságának csökkenése egyéb szennyező jelenlétében, vagy a fém egyéb oldott szennyezőinek eleve meglevő késleltető hatása. Gyakran találkozunk az irodalomban bizonyos adalékok újrakristályosodást gyorsító hatásával [4]. Ez általában azzal magyarázható, hogy a fémekben már meglevő fékező hatás az adalékkal képződő kiválás vagy annak méretváltozása miatt lecsökken.

A kísérleti eredmények szerint az újrakristályosodást a legjobban az oldott szennyezők késleltetik. Erre példa az alumíniumban szilárd oldatban levő és a kiválásokat képező vas hatása közötti eltérés. Montariol ugyanis kimutatta, hogy a magképződési sebesség fél, a növekedési sebesség pedig másfél nagyságrenddel nagyobb, ha a vas nem oldott formában, hanem kiválásban van a fémbe [5]. Ez azonban nem azt jelenti, hogy a kiválásoknak nem lehet jelentős szerepe a hőállóság növelésében. A hatás mértéke nagyban függ a részecskék méretétől, számától és alakjától [6]. Az is előfordulhat, hogy a kiválás a diszlokációsűrűség növelése révén nem hogy késleltetné, de gyorsítja a fém újrakristályosodását [7].

2. ELMÉLETI ÁTTEKINTÉS

Ha a primer újrakristályosodásra kifejtett hatást leszűkítjük az oldott állapotban levő, egyféle adaléknak a vizsgálatára tiszta fémbe, akkor is nehezen tudjuk szétválasztani a magképződésre és a növekedésre gyakorolt hatást. A kísérleti eredmények alapján feltételezhető, hogy az oldott mikroötvözők elsősorban a növekedési folyamatot befolyásolják [5]. Alumíniumban a rekrisztallizáció általában szubszemcse növekedéssel történik [8], így itt az a közelítés, hogy az oldott adalékelemek rekrisztallizációra gyakorolt hatása a szemcsehatár-mozgás fékezésének felel meg, alkalmazható. A magnézium és acél újrakristályosodása is értelmezhető a szennyezők szemcsehatár mozgást gátló hatásával [9, 10].

A korábbi modellek továbbfejlesztésével *Lücke és Stüwe* [11], valamint *Cahn* [12] dolgozta ki a szemcsehatár-mozgás elméletét oldott idegen atomok jelenlétében. Feltételezték, hogy a szemcsehatár fékezése az ötvöző és a határ közötti rugalmas kölcsönhatás következménye, és a fékező hatást a határral együttmozgó szennyező



1. ábra. A szemcsehatármozgás sebessége a hajtóerő függvényében

diffúziójának sebessége határozza meg. Elegendően nagy hajtóerő vagy hőmérséklet, ill. kis szennyező koncentráció esetén a határ leszakadhat a szennyezésről, s ekkor a szemcsehatár-mozgás sebessége nem függ a fém adalékelem tartalmától [13].

Általános esetben, ha mindazon tényezőket figyelembe vesszük, amelyek a szemcsehatár-mozgást befolyásolják, a hajtóerő és a szemcsehatár-mozgás közötti kapcsolat csak igen bonyolult összefüggéssel írható le. Ehhez ismernünk kellene a szennyező és a határ kölcsönhatási energiáját, $U_B(x)$ -t és az oldott ötvöző atom diffúziós profilját, $D(x)$ -t a határra merőleges irányban. Cahn közelítő megoldása a P hajtóerőre [12]:

$$P \cong \frac{V}{m} + \frac{\alpha c V}{1 + \beta^2 V^2},$$

ahol V a szemcsehatármozgás sebessége, c az oldott ötvözők koncentrációja, α és β az U_B kölcsönhatási energia és a D diffúziós állandó függvénye. A $V-P$ összefüggés koncentráció függését az 1. ábrán ábrázoltuk. Kis koncentrációknál a sebesség a hajtóerő egyértékű függvénye és csak kevésbé tér el a tiszta fémre jellemző egyenestől. Nagy koncentrációk esetén a görbe S alakú és a középső része instabil állapotot jelent, egy kritikus hajtóerőt elérve a szemcsehatár-mozgás sebessége ugrás-szerűen megváltozik. A kísérleti és elméleti eredmények összehasonlításához két határesetet célszerű figyelembe venni.

1. Kis V szemcsehatármozgási sebességnél:

$$V = \frac{P}{1/m + \alpha c}.$$

Eszerint $1/V$ lineáris függvénye a koncentrációnak, és a folyamat aktiválási energiája az ötvözőatomok diffúzió aktiválási energiája közelébe eső érték.

2. Nagy határmozgási sebességeknél, amikor $V \gg 1/\beta$ a következő összefüggés adódik:

$$V \cong mP - \frac{\alpha}{\beta^2} \frac{c}{P},$$

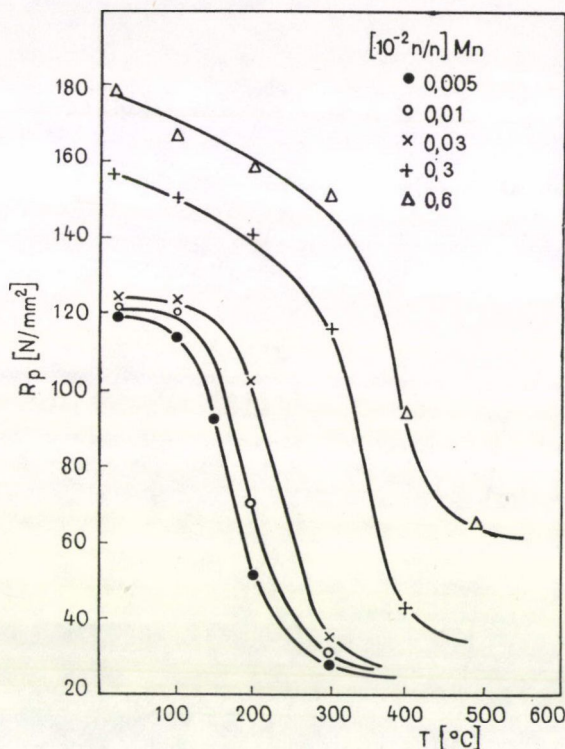
ahol a szennyezők fékező hatása egyetlen paraméterrel jellemezhető. Eszerint a gyorsabban diffundáló oldott atom eredményez nagyobb fékező hatást. A folyamat aktiválási energiája a szemcsehatármenti öndiffúzió aktiválási energiájának közelébe esik.

A két tartomány közötti átmeneti részen a határmozgás sebessége a hajtóerő nagyságától függően folytonosan vagy nem folytonosan változik.

A Cahn-elmélet kis oldott koncentrációk esetén érvényes. Megkötése továbbá, hogy a szemcsehatár síkszerű, és a szennyezők diffúziója csak a határra merőleges irányban történik [13]. Általánosabb esetben a szennyezők a határ mentén is diffundálhatnak [14]. Ez a modell ugyancsak két, eltérő sebességű határmozgást ír le, az átmeneti tartományban azonban az elmélet nem érvényes. Az elmélet és a kísérlet összevetése általában csak kvalitatív eredményekhez vezet amiatt, hogy az elméleti modellben szereplő paraméterek nem ismeretesek. Az összehasonlítást nehezítik kísérleti problémák is. Direkt összevetésre általában csak egyetlen szemcsehatár mozgásának követésével van mód. A gyakorlati esetek többségében csak a modell határeseiteinek kvalitatív igazolása lehetséges.

kisebb koncentrációk tartományában. A fém eredendően meglevő 100 ppm szennyezőtartalma miatt az általuk vizsgált tartomány a nagy koncentrációk tartományába esik.

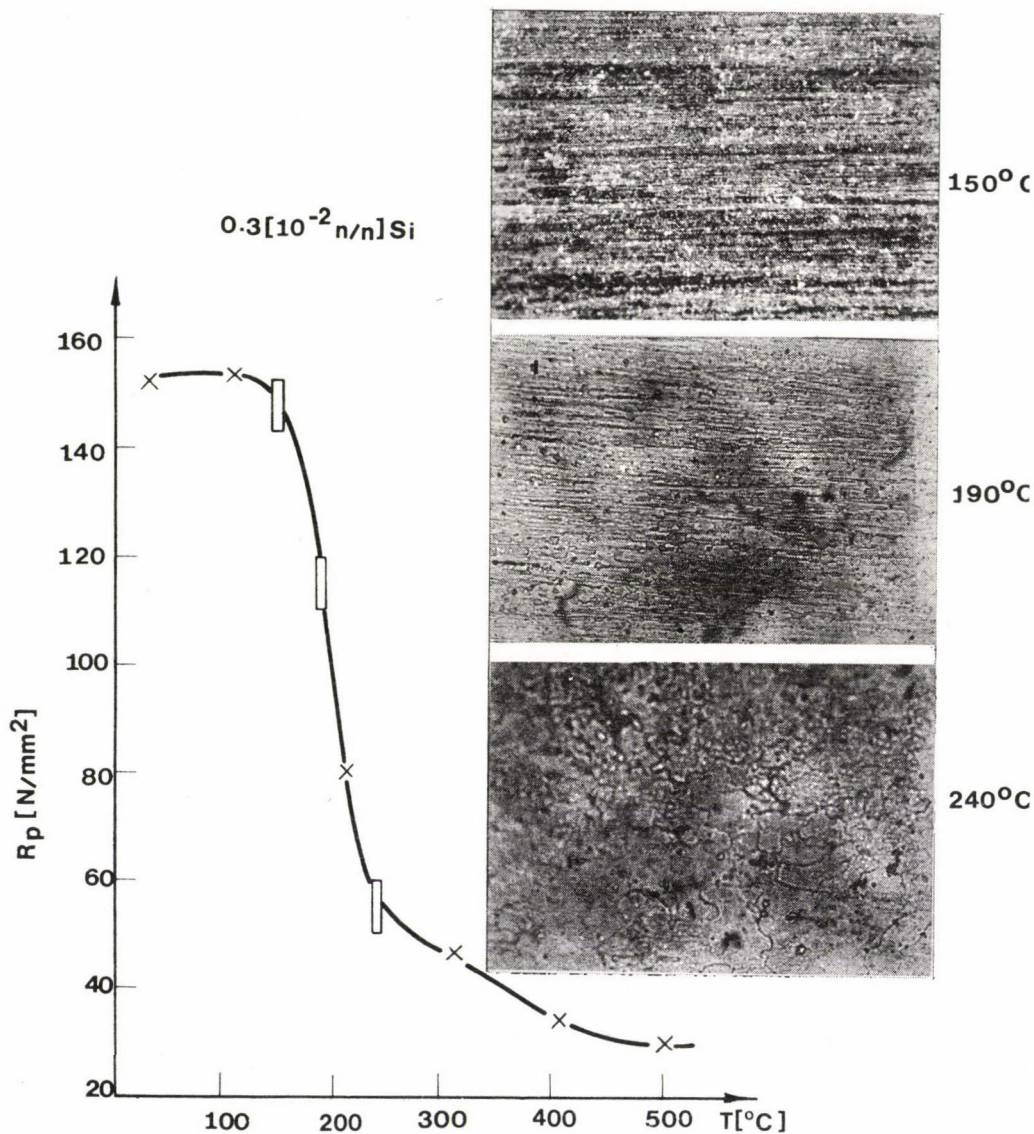
Az adalékok hatásának vizsgálatára a mechanikai vizsgálatok is alkalmasak. Hidegen alakított, nagy folyáshatárral rendelkező szilárd oldatos ötvözeteknek a tulajdonságai ugyanis alig változnak az újrakristályosodást megelőző hőkezelés során, a rekrisztallizáció azonban a szilárdság és a folyáshatár nagymértékű csökkenésével és a képlékenység növekedésével jár együtt.



3. ábra. A folyáshatár változása a hőkezelési hőmérséklet függvényében Al-Mn ötvözetekben
Hőkezelési idő 1 óra

Vizsgálatokat végeztünk 99,999% tisztaságú kétalkotós alumíniumötvözeteken, amelyekben az ötvöző koncentráció 10 és 1000 $\mu\text{g/g}$ között változott. 1 órás izokron hőkezelést alkalmaztunk a 99%-ra hidegen alakított huzalokon és vízedzés után mértük a sztatikus mechanikai jellemzőket. A döntően szilárd oldat állapotban levő Mg, Cu, Si, Ag, Ce, Y, Mn, Cr és Fe hatását vizsgáltuk. Az újrakristályosodás hőmérsékletének azt a hőmérsékletet tekintettük, amelyen végzett hűntartás során a folyáshatár és a szakítószilárdság csökkenés maximális sebességű [17]. A 3. ábrán Al-Mn ötvözeteken kapott eredmények láthatók. Az R_p folyáshatár nagymértékű csökkenését megelőzően is van kisebb változás, ami az újrakristályosodást megelőző

megújulás következménye. Néhány szilárd oldatos ötvözetben a megújulás nem csak folyáshatár csökkenéssel, hanem növekedéssel is együttjár, ami az oldott ötvözőatomok és diszlokációk termikus aktiváláskor kialakuló kölcsönhatásával függ össze [18]. Annak bizonyítására, hogy a folyáshatár nagymértékű csökkenéséhez tartozó hőmérséklet az újrakristályosodási hőmérsékletnek felel meg, a mechanikai méréseket metallográfiai vizsgálattal egészítettük ki. A 4. ábrán a kétféle mérési

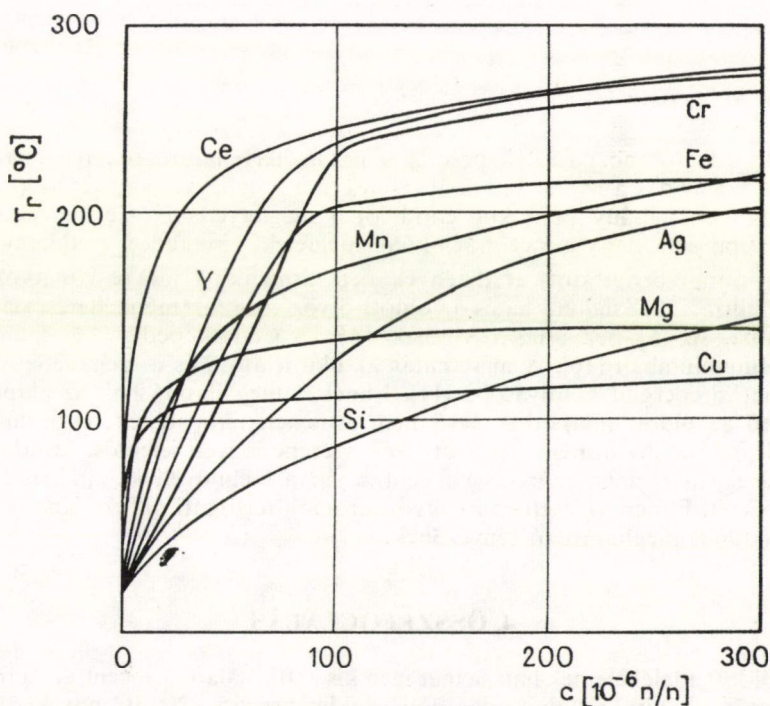


4. ábra. A szerkezet és a folyáshatár változása hőkezelés során Al-Si 0,3% ötvözetben

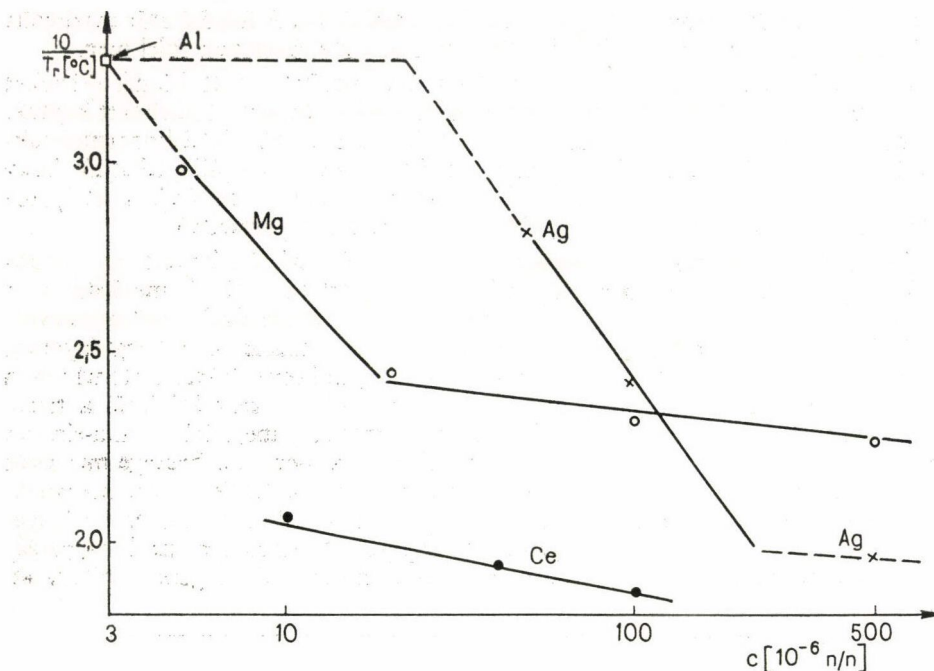
módszerrel Al-Si ötvözetben kapott eredményt mutatjuk be. A folyáshatár maximális csökkenéséhez tartozó hőmérséklet kb. 50%-os rekrisztallizációnak felel meg.

A különböző koncentrációjú ötvözeteken így meghatározott hőmérsékleteket a koncentráció függvényében ábrázoltuk és az 5. ábrán bemutatott görbéket kaptuk. Látható, hogy az újrakristályosodásra kifejtett hatás 100 $\mu\text{g/g}$ alatti koncentrációknál a legnagyobb. Összehasonlítva a nem átmeneti fémeket, megállapíthatjuk, hogy az utóbbiak lényegesen nagyobb mértékben gátolják az alumínium újrakristályosodását. A legerősebb hatást kismennyiségű Ce ötvözeskor tapasztaltuk.

Az adalékelemek rekrisztallizációra kifejtett hatásának értelmezéséhez feltételeztük, hogy állandó hajtóerő és hőkezelési idő mellett az általunk meghatározott újrakristályosodási hőmérséklet a szemcsehatármozgás sebességével fordítva arányos. Az $1/T_{\text{rekr}}$ értékeket ábrázolva a koncentráció logaritmusának a függvényében, a 6. ábrán látható görbéket kaptuk. Az Ag csak 50 ppm koncentráció tartományban befolyásolja a szemcsehatármozgás sebességét. Kisebb koncentrációknál a tiszta alumíniumra jellemző érték extrapolálható. Ez a tartomány megfelel a Cahn-elmélet alapján a kis koncentrációjú résznek. 200 ppm felett a mozgás sebessége már csak kisebb mértékben csökken, ez felelhet meg a nagykoncentrációjú tartománynak. A két részt összekötő átmeneti tartomány esetünkben kiszélesedik, szélessége lényegesen nagyobb, mint a Frois és Dimitrov által tapasztalt. Az eltérés azzal magyarázható, hogy mi nem a leggyorsabban növekvő szemcsék sebességének változását,



5. ábra. Az újrakristályosodási hőmérséklet az adalékelemek koncentrációjának a függvényében



6. ábra. Az újrakristályosodás hőmérsékletének változása a koncentráció függvényében

hanem az átlagos mozgással kapcsolatos paramétert határoztuk meg. Az Ag-nál tapasztalt tagozódás a Mg tartalmú ötvözeteken is megfigyelhető, bár itt az átmeneti tartomány már néhány ppm koncentrációnál megfigyelhető. Ce hatására viszont már a 10 ppm is a nagy koncentrációknak megfelelő viselkedést eredményezi.

A 6. ábrán bemutatott eredmények nem átmeneti fémekre vonatkoznak. Itt a rekrisztallizációt késleltető hatás az oldott ötvözőatomok méreteltérésevel hozható kapcsolatba. Az Ag-nek alig, a Mg-nak 14%, a Ce-nak pedig 26% méreteltérése van az alumíniumban [16]. A mérethatás az oldott atom és a szemcsehatár közötti kölcsönhatási energiát befolyásolja [11]. Ennek a megállapításnak az alapján előre becsülhető az oldott állapotban levő nem átmeneti fém adalék rekrisztallizációra gyakorolt hatása. Az átmeneti fém ötvözők szerepe is igen jelentős. Mind az oldott Fe, mind a Mn és a Cr már kis koncentrációban megnöveli az újrakristályosodás hőmérsékletét. Ebben az esetben az ötvözőatomok térfogati diffúziójának aktiválási energiája tűnik meghatározó tényezőnek.

4. ÖSSZEFOGLALÁS

Az oldott adalékelemek hatása már igen kis, 0,01 % alatti koncentrációtartományban jelentős, az újrakristályosodás hőmérsékletében 15–200 °C növekedést okoz, ami a hőállóság nagymértékű növeléséhez vezet. Nagyobb koncentrációk már nem befolyásolják számottevően a fém rekrisztallizációját. A nem átmeneti fém adalékok

a mátrixhoz viszonyított méreteltérésük arányában, az átmeneti fémek a szennyezés térfogati diffúziójának aktiválási energiája mértékében fékezik le az újrakristályosodást. Ezek a közelítő összefüggések támpontul szolgálhatnak a gyakorlati szakember számára a fémek hőállóságának növelésében.

IRODALOM

1. C. Frois and O. Dimitrov, *Ann Chim. I.*, 113, 1966.
2. P. Gordon and R. A. Vandermeer, *Trans Met. Soc. AIME*, 224, 1917, 1962.
3. F. Haessner, (ed.), *Recrystallization of Metallic Materials*, Riederer Verlag, Stuttgart, 1978. p. 137.
4. Vitányi Pálné, Egyetemi doktori értekezés, Miskolc, 1979.
5. F. Montariol, *Metaux et Corrosion*, 38, 223, 1963.
6. F. Haessner (ed.), *Recrystallization of Metallic Materials*, Riederer Verlag, Stuttgart, 1978. p. 159.
7. P. R. Mould and P. Cotterill, *J. Mat. Sci.* 2, 242, 1967.
8. B. Bay, *Scripta Met.* 4, 489, 1970.
9. R. Fromagean, J. L. Pastol and G. Revel, *Comptes Rendus Acad. Sci.* 282c, 379, 1976.
10. P. Aubrun and P. Rocquet, *Mem. Sci. Rev. Mat.* 72, 1, 1975.
11. L. Himmel (ed.), *Recovery and Recrystallization of Metals*, Intersci. Publ. New York. 1963. p. 171.
12. J. W. Cahn, *Acta Met.* 10, 789, 1962.
13. Rajkovits Zs. és Kovács I., *Magyar Fizikai Folyóirat* 24, 45, 1975.
14. C. L. Bauer, *J. De Physique. Colloque*, C4. 36, 333, 1975.
15. C. Frois and O. Dimitrov, *Comptes Rendus Acad. Sci.* 253, 2532, 1961.
16. M. E. Dritz, E. S. Kadaner, S. Nguen Din, *Izvest. Akad. Nauk. SSSR Metall*, Nov.-Dec. 150, 1969.
17. E. Kovács-Csetényi, 5th Intern. Conf. on High Purity Materials in Science and Technology, Drezda, 1980. Poster Abstracts, 36. o.
18. E. Kovács-Csetényi and I. Kovács, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 21, K25, 1974.

10. KÉTFÁZISÚ ÖTVÖZETEK REKRISZTALLIZÁCIÓJA

HONYEK GYULA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	537
2. Túltelített szilárd oldatok rekrisztallizációja	537
3. Folytonos vagy in-situ rekrisztallizáció	540
4. A hőmérséklet, a túltelítettség, a diszlokáció sűrűség és a hőkezelési idő hatása a rekrisztallizációs viselkedésre	541
5. Diszperz részecskéket tartalmazó ötvözetek rekrisztallizációja	543
6. Kétfázisú ötvözetek szemcsenövekedése	546
7. Összefoglalás	548
8. Irodalom	548

1. BEVEZETÉS

A 7. fejezetben néhány modell segítségével áttekintettük a nagyszögű szemcsehatárok mozgásának legfontosabb hajtó- és fékező erőit, és néhány egyszerű esetben megvizsgáltuk a hajtó- és fékező erők egyensúlyának feltételeit. A modellszerű tárgyalásmód megkönnyítette a rekrisztallizáció során fellépő egyes mechanizmusok lényegének megértését. Természetesen ezek a modellek nem jellemzik a konkrét kísérleti vizsgálatok esetén fellépő összetett jelenségeket. Ezért a további fejezetekben megmutattuk, hogy a rekrisztallizáció különféle típusai hogyan játszódnak le a valóságban. Ezt folytatva, ebben a fejezetben a kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációjának a tárgyalásával szemléltetjük, hogy milyen módon jelentkeznek egymás mellett, ill. egymással szemben a szemcsehatár-mozgás hatásmechanizmusai valódi anyagok esetén, és hogyan befolyásolják a rekrisztallizációs viselkedést olyan egyéb paraméterek, mint a hőmérséklet, a túltelítettség, a diszlokáció sűrűség, a hőkezelési idő, a diszperz részecskék mérete stb.

A legtöbb gyakorlatban felhasznált vas, alumínium vagy rézötvözet nem stabil homogén szilárd oldat állapotú, hanem legtöbbször több fázist alkot, amelyek általában nincsenek termodinamikai egyensúlyban. A túltelített szilárd oldatok és a kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációja lényegesen eltér a tiszta fémek, illetve a stabil homogén szilárd oldatok újrakristályosodásától, és gyakorlati jelentősége miatt vizsgálata az irodalomban meglehetősen kiterjedt [1–6].

2. TÚLTELÍTETT SZILÁRD OLDATOK REKRISZTALLIZÁCIÓJA

Kristályhibákat tartalmazó túltelített ötvözetben a második fázisú részecskék kiválása és a rekrisztallizáció ugyanazon a hőmérsékleten lejátszódhat. Ilyen esetben a precipitáció és a rekrisztallizáció kölcsönösen befolyásolják egymást. A kialakuló részecskék akadályozzák a diszlokációk átrendeződését rekrisztallizációs frontokba

és gátolják ezek további mozgását is. A rácshibák nagymértékben elősegíthetik az egyes fázisok nukleációját, ami viszont hatással lehet a diszlokáció átrendeződésre és a szemcsehatár-mozgásra. A nemfolytonos precipitáció, éppen ellenkezőleg, megnöveli a rekrisztallizációs front sebességét. A két folyamat csak akkor zajlik le egymástól függetlenül, ha a rekrisztallizáció teljesen befejeződik a kiválós reakció megindulása előtt, vagyis a kiválós folyamat inkubációs ideje alatt.

Annak érdekében, hogy képet nyerjünk, milyen feltételek mellett hat egymásra kölcsönösen a precipitációs és a rekrisztallizációs folyamat, meg kell vizsgálni mindkét folyamat megindulásának hőmérsékletfüggését. A rekrisztallizáció beindulása (feltéve, hogy a rekrisztallizációs magok mérete állandó) a következő összefüggést követi [7]:

$$t_R = t_{R_0}(q) \exp \frac{Q_R(q)}{RT}, \quad (1)$$

ahol t_{R_0} a folyamat hajtóerejét, entrópia tagot és geometriai faktorokat tartalmazó tényező. $Q_R(q)$ a rekrisztallizációs front képződésének aktiválási energiája, amely az öndiffúzió aktiválási energiájának nagyságrendjébe esik, és némileg csökken a q diszlokációsűrűség növekedtével.

A precipitáció inkubációs idejét (feltéve, hogy csak egy stabil második fázis létezik) a következő egyenlet adja meg [7]:

$$t_p = t_{p_0}(q) \exp \frac{Q_p(T, q) + Q_D}{RT}, \quad (2)$$

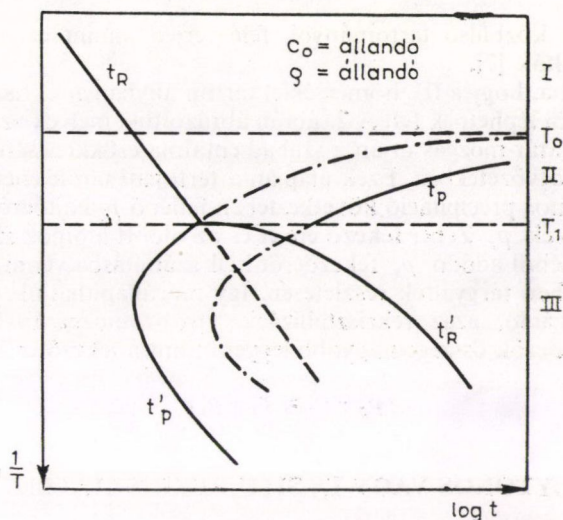
ahol t_{p_0} ismét entrópia tagot és geometriai faktorokat tartalmazó tényező, míg $Q_p(T, q)$ a második fázis nukleációjának aktiválási energiája és Q_D a diffúziós aktiválási energia. Megjegyezzük, hogy alacsony hőmérsékleteken $Q_p(T, q)$ elhanyagolható Q_D -hez képest. Az 1. ábrán mindkét folyamat beindulásának hőmérsékletfüggését ábrázoltuk, ennek alapján a rekrisztallizációs viselkedésben három hőmérséklet-tartomány különböztethető meg:

I. A $T > T_0$ hőmérsékleteken a rekrisztallizációt csak az ötvöző atomok szemcsehatárba való belépése befolyásolja, kiválós folyamat nem játszódik le, mivel az adott ötvöző koncentráció a T_0 -nak megfelelő oldhatóság (lásd: 7. fejezet, 2. ábra).

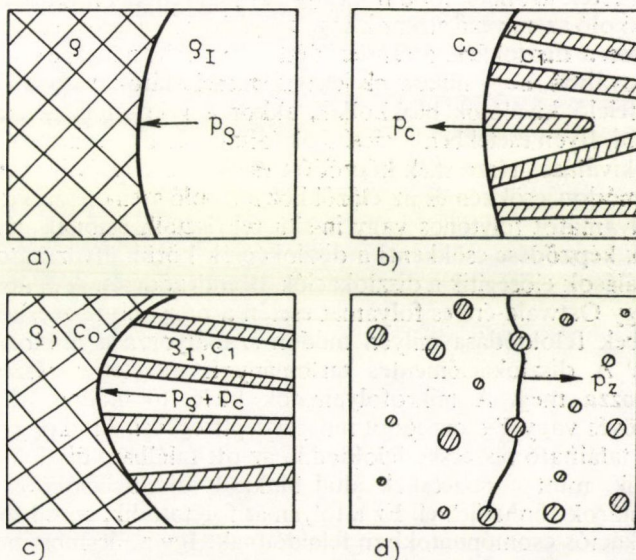
II. Ha $T_0 > T > T_1$, akkor mindig fellép egy kezdeti tiszta rekrisztallizációs folyamat, amelyet szintén csak az ötvöző atomok szemcsehatárba való belépése befolyásol. Kiválós folyamat csak a rekrisztallizáció bizonyos mértékű lejárásodása után kezdődik el.

III. Ha $T < T_1$, akkor a kialakuló részecskék befolyásolják mind a diszlokációk rekrisztallizációs frontokba rendeződését, mind mozgásukat.

Ezt a viselkedést sok túltelített és alakított ötvözet esetén megtalálták, pl. Al-Fe ötvözetekben elektromos ellenállás és elektronmikroszkópos vizsgálatok alapján [8]. Mivel a T_1 hőmérséklet határ nem túl éles, és az alakított ötvözetek deformációs szerkezete nem homogén, hanem bennük deformációs sávok alakulnak ki, előfordulhat, hogy az I. és II. tartományra jellemző viselkedés egyszerre lép fel a minta különböző részeiben. A rekrisztallizáció és a precipitáció a deformációs sávokban



1. ábra. A precipitáció és a rekrisztallizáció kezdetének hőmérsékletfüggése (t_p a precipitáció kezdete deformáció mentes ötvözetben, t'_p diszlokációk jelenlétében; t_R a rekrisztallizáció kezdete szilárd oldatban, t'_R kiválasztási folyamat esetén)



2. ábra. A nemfolytonos rekrisztallizáció mechanizmusainak vázlatos ábrázolása: a) A szemcsehatármozgás folyamán a diszlokáció sűrűség g -ról g_I értékre csökken; b) Nemfolytonos precipitáció: az oldott atomok c_0 túltelített koncentrációja analóg módon viselkedik az előző esetbeli diszlokáció sűrűségéhez képest; c) Az előző két mechanizmus együtt jelentkezik; d) A diszperz részecskék fékző erőként hatnak

kezdődik, majd a közbülső tartományok felé terjed, amint ezt deformált Al-Cu ötvözeteken igazolták [7].

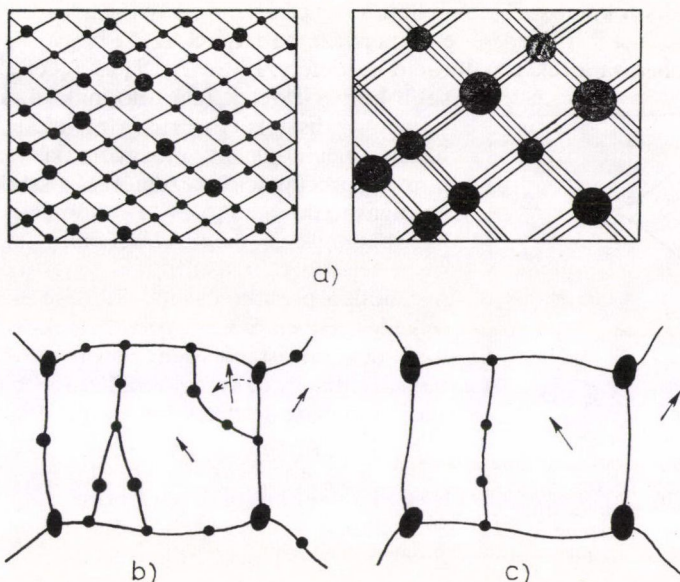
Vegyük számba, hogy a III. hőmérséklet tartományban a rekrisztallizáció milyen hajtó- és fékezőerői léphetnek fel. A 2. ábrán ábrázoltuk, melyek azok a folyamatok, amelyek szemcsehatár-mozgás útján a szabad entalpia csökkenésére vezetnek deformált és túltelített ötvözetekben. Ezek alapján a térfogati tárolt energiából származó p_e és a nemfolytonos precipitáció következtében fellépő p_c hajtóerőket, illetve a második fázisrészecskék p_z Zener fékező erejét és az oldott atomok szemcsehatárokon történő tömörüléséből adódó p_s fékezőerőt kell számításba venni. Ezek mechanizmusát a 7. fejezetben tárgyaltuk részletesen. Így megállapíthatjuk, hogy a nemfolytonos rekrisztallizáció, azaz rekrisztallizációs front mozgásának szükséges feltétele, hogy a hajtóerők összege nagyobb legyen, mint a fékező erők, vagyis:

$$p_e + p_c > p_z + p_s. \quad (3)$$

3. FOLYTONOS VAGY IN-SITU REKRISZTALLIZÁCIÓ

Az előzőekben minden esetben feltételeztük, hogy a mintában létezik mozgásra képes szemcsehatár. Ilyen rekrisztallizációs front képződhet a mintában már meglevő szemcsehatárból, vagy diszlokáció átrendeződésből. Tiszta fémekre a diszlokáció átrendeződés aktiválási energiája az öndiffúzió aktiválási energiájának nagyságrendjébe esik. Ez az érték azonban több mint egy nagyságrenddel megnövekedhet a diszlokációkat blokkoló szennyező atomok vagy megfelelő kiválasos részecskék hatására, következésképpen a diszlokáció átrendeződést a részecske növekedés szabályozhatja. Ha feltesszük továbbá, hogy nincsenek jelen szemcsehatárok, vagy a létező szemcsehatárokat megfelelő kiválasok blokkolják, akkor a rekrisztallizációs frontok nem képesek mozogni. Ilyen esetekben a rácshibák (diszlokációk, szemcsehatárok) eltűnését kizárólag a kiválasos részecskék képződése és oldódása szabályozza. Ha a szabad entalpia ilyen módon csökken és az előzőkhöz hasonló szemcse szerkezet keletkezik, akkor ezt a folyamatot folytonos vagy in-situ rekrisztallizációnak nevezzük.

Részecskék képződése csökkenti a diszlokációk körüli ötvöző atomok mennyiségét, így a kiválasok elősegítik a diszlokációk átrendeződését. A 3. ábra azt szemlélteti, hogy pl. egy Ostwald-éreses folyamat esetén a nagyobb részecskék növekedése, illetve a kisebbek feloldódása milyen módon szabályozza a diszlokációk további átrendeződését. A diszlokációmentes tartományok méretét a részecskék közötti távolság határozza meg. A mikrofolyamatok kielégítő módon írhatók le szubszemcse összenövés vagy Y-csomópont mozgás segítségével. Amikor egy diszlokációs csomópontban található részecske feloldódik, az ott található diszlokációk mozgása könnyebbé válik, mint a részecskék által blokkolt diszlokációké és ilyen módon szubszemcse határok tűnhetnek el. Ez a folyamat folytatódik, amint további részecskék más diszlokációs csomópontokban feloldódnak. Így a rácshiba mentes területek és az általuk bezárt szögek növekednek. Ezen növekedés hatására a diszlokáció hálózat szemcsehatár jellegűvé válik annak ellenére, hogy a nemfolytonos rekrisztallizációhoz szükséges feltételek a folyamat közben nem teljesülnek. Ez a folyamat végeredményben bármilyen rekrisztallizációs front mozgása nélkül olyan szemcse szerkezethez vezet, amely csak a szemcse méret és a részecskék eloszlásában, illetve a textúrában különbözik a nemfolytonos, rekrisztallizált szerkezetektől [9].

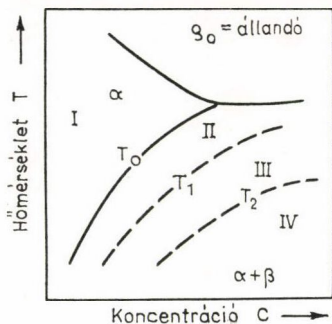


3. ábra. A folytonos rekrisztallizáció mechanizmusainak vázlatos ábrázolása: a) Nincs mozgásra képes szemcsehatár, a diszlokációk elűnését és átrendeződését a részecske növekedés szabályozza. Szubszemcsék alakulnak ki, amelyek mérete és orientáció különbsége a vonalak sűrűségének megfelelően növekszik; b) A szubszemcse határokat a részecskék blokkolják; c) A kis méretű részecskék feloldódása után a szubszemcsék Y-csomópont mozgással (balra) vagy a nyilak által jelzett szubszemcse forgással (jobbra) tűnhetnek el

4. A HŐMÉRSÉKLET, A TÚTELÍTETTSÉG, A DISZLOKÁCIÓ SŰRÜSÉG ÉS A HŐKEZELÉSI IDŐ HATÁSA A REKRISZTALLIZÁCIÓS VISELKEDÉSRE

A III. hőmérséklet-tartományban, ahol a precipitációs és a rekrisztallizációs folyamatok kölcsönösen hatnak egymásra, folytonos és nemfolytonos rekrisztallizáció egyidőben is lejátszódhat. Egy alakított és tútelített ötvözetben a rekrisztallizáció megkezdődése előtt a kiválásos részecskék f térfogati hányada T_1 hőmérsékleten zérus. A hőmérséklet további csökkentése esetén a rekrisztallizáció megkezdése előtt képződő kiválások térfogati hányada egyre jelentősebb, mivel a precipitációhoz szükséges inkubációs idő és az oldhatósági határ csökken. Alacsonyabb hőmérsékleteken a kiválásos részecskék mérete is csökken. Így diszlokáció átrendeződés és a szemcsehatár-mozgás egyre kevésbé játszódhat le a hőmérséklet csökkenésével. Továbbá a határ mozgékonysága és a $p = p_e - p_z$ eredő hajtóerő is csökken alacsonyabb hőmérsékleteken, vagyis a rekrisztallizáció kezdete egyre hosszabb idők felé tolódik. A T_2 hőmérsékletet elérve a nemfolytonos folyamat megszűnik és a rekrisztallizáció csak folytonos módon játszódhat le, amit döntően a részecskék durvábbá válása irányít.

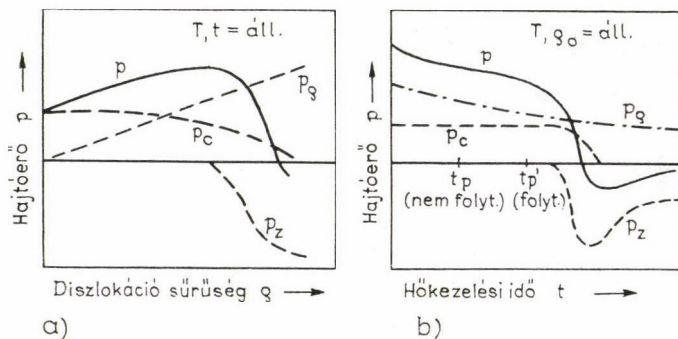
Állandó diszlokációsűrűség mellett a koncentráció növelése a kiválásos folyamat inkubációs idejének csökkenését eredményezi, ha feltételezzük, hogy a koncentrációnak csekély a hatása a rekrisztallizáció kezdetére. Így a T_0 , T_1 és T_2 értékek a magasabb hőmérsékletek felé tolódnak (4. ábra).



4. ábra. A koncentráció hatása deformált, túltelített szilárd oldatok rekrisztallizációs viselkedésére: I. tartomány: normál rekrisztallizáció precipitáció nélkül, II. tartomány: a precipitációt megelőzi a rekrisztallizáció, III. tartomány: nemfolytonos rekrisztallizáció kiválásos folyamattal együtt, IV. tartomány: folytonos rekrisztallizáció

A ρ diszlokációsűrűség növelése a rekrisztallizáció megindulását meggyorsítja, azaz feltéve, hogy a precipitáció kezdetét a diszlokációk nem befolyásolják, a T_1 és T_2 hőmérséklet értékek lecsökkennek és megfelelően nagy diszlokációsűrűség felett a rekrisztallizáció teljes mértékben befejeződik a precipitáció megkezdése előtt. Ilyen viselkedést észleltek Cu-Co ötvözetekben [10].

Az újrakristályosodás folyamata bonyolultabbá válik, ha a diszlokációk alacsony energiájú nukleációs helyek létesítésével meggyorsítják a folytonos precipitációt. A diszlokációsűrűség növelése valóban tovább növeli a p_0 hajtóerőt, de egyben lecsökkenti a folytonos kiválások t_p inkubációs idejét. Állandó t_1 izoterm hőkezelési időt választva az egyes hajtó- és fékezőerők deformáció függését mutatja vázlatosan az 5.a ábra. A p_0 hajtóerő a diszlokáció sűrűséggel növekszik. Egy kritikus ρ diszlokációsűrűség felett a t_p inkubációs idő t_1 -nél rövidebbé válik és így a hőkezelés befejeződése előtt mindig megindul a folytonos precipitáció. Ez a precipitáció lecsökkenti a p_c hajtóerőt, mivel a mátrix c koncentrációja csökken, míg a p_z fékezőerő ugyanakkor megnő a határ előtti diszlokációkon képződő részecskék következtében. Az egyszerre fellépő hatásokból származó $p = p_0 + p_c - p_z$ eredő hajtóerő maximális értékét egy közepes diszlokáció sűrűségnél veszi fel. Valójában az is lehetséges, hogy egy magasabb diszlokációsűrűségnél a nemfolytonos rekrisztallizáció feltételei már nem teljesülnek, hanem folytonos folyamatok zajlanak le, azaz a diszlokációkon történő kiválások és folytonos rekrisztallizáció.



5. ábra. A reakció frontra ható hajtóerők a ρ diszlokáció sűrűség (a) és a t hőkezelési idő (b) függvényében (Ni-Be ötvözetek viselkedésére érvényes vázlat [11])

A szemecsehatár előtti állapotok mindig időfüggőek (5.b. ábra). Állandó hőmérsékleten a határra ható erőket a következő folyamatok határozzák meg: p_e csökken a megújulási folyamatok következtében; p_c csökken, ha folytonos precipitáció kezdődik a nemfolytonos reakció előtt, míg p_z ugyanezen ok miatt növekszik; hosszabb hőkezelés után p_z újra csökken a részecskék durvulása következtében. Az eredő hajtóerő a hőkezelési idő növelésével egészen addig csökken, amíg a nemfolytonos rekrisztallizáció feltételei már nem teljesülnek és a folyamat leáll.

Az újrakristályosodás ezen összetett folyamata jól teljesül Ni-Be ötvözetekben [11], ahol a reakció módja a fent ismertetett módon a deformáció mértékének növelésével nemfolytonos precipitációból és rekrisztallizációból folytonos folyamatokra változik.

5. DISZPERZ RÉSZECSKÉKET TARTALMAZÓ ÖTVÖZETEK REKRISZTALLIZÁCIÓJA

Ebben a részben olyan ötvözetek rekrisztallizációjával foglalkozunk, amelyek termodinamikailag stabil, diszperz részecskéket tartalmaznak. Ha egy ilyen ötvözetet deformálunk, akkor a részecskék három különböző típusú viselkedését figyelhetjük meg méretük, alakjuk és mechanikai tulajdonságaiktól függően:

a) A diszlokációk átfutnak a részecskéken és elnyírják azokat. Ez a viselkedés a részecskék mechanikai oldódásához vezethet, ha sok csúszási rendszer működik nagy deformációk mellett. Az így létrehozott túltelített szilárd oldatra ugyanazok érvényesek, mint a 2. pontban tárgyaltak. Ez az eset különösen nagyon törékeny, vékony lemez vagy rúd alakú kiválások részecskék esetén valósul meg. Általánosságban érvényes, hogy amikor a részecskék a képlékeny alakítás közben nem stabilak, kis és közepes mértékű deformáció után mikroszkopikus inhomogenitásokat, azaz deformációs síkokat vagy sávokat találunk [12, 13].

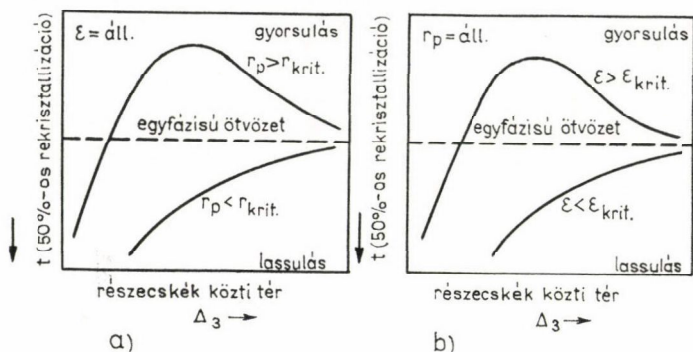
b) Azok a kisméretű részecskék (például oldott atomok), amelyek elég erősek ahhoz, hogy az alakítás közben változatlanok maradjanak, a mintában mikroszkopikusan homogén deformációt eredményeznek [14].

c) A kemény, nagyméretű, inkoherens részecskék újra helyi inhomogenitásokat okoznak, mivel ezek diszlokációkat hozhatnak létre a felületükön és így a részecskék közelében nagy mértékű ráctorzulások jöhetnek létre képlékeny folyással [15].

Számos kísérleti vizsgálat alapján nyilvánvaló, hogy a diszperz részecskék egyaránt képesek a rekrisztallizációt gyorsítani és lassítani a részecskementes mátrix viselkedéséhez képest. Az ötvözetek összetételétől függetlenül megállapíthatjuk, hogy a nagyméretű, egymástól távol elhelyezkedő kiválások gyorsítják, míg a kisméretű, közeli részecskék lassítják a rekrisztallizációt. A következőkben megvizsgáljuk a részecske méret, a részecskék közötti távolság és a diszlokációsűrűség hatását az újrakristályosodásra.

Nem deformálható, második fázisú részecskék megnövelik a kristály diszlokációsűrűségét a részecske nélküli mátrixhoz képest, így a rekrisztallizáció hajtóereje megnő. A részecskeméret vagy a deformáció növelésével a részecskék körüli diszlokációszerkezet összetettebbé válik. A nagyméretű részecskék helyi ráctorzulásokat okoznak és feltéve, hogy a deformáció egy kritikus értéket meghalad (ami a részecskék méretétől függ), a részecskék elősegítik a rekrisztallizáció nukleációját. A kisméretű részecskék azonban a diszlokációeloszlás homogenitását javítják, így a nuk-

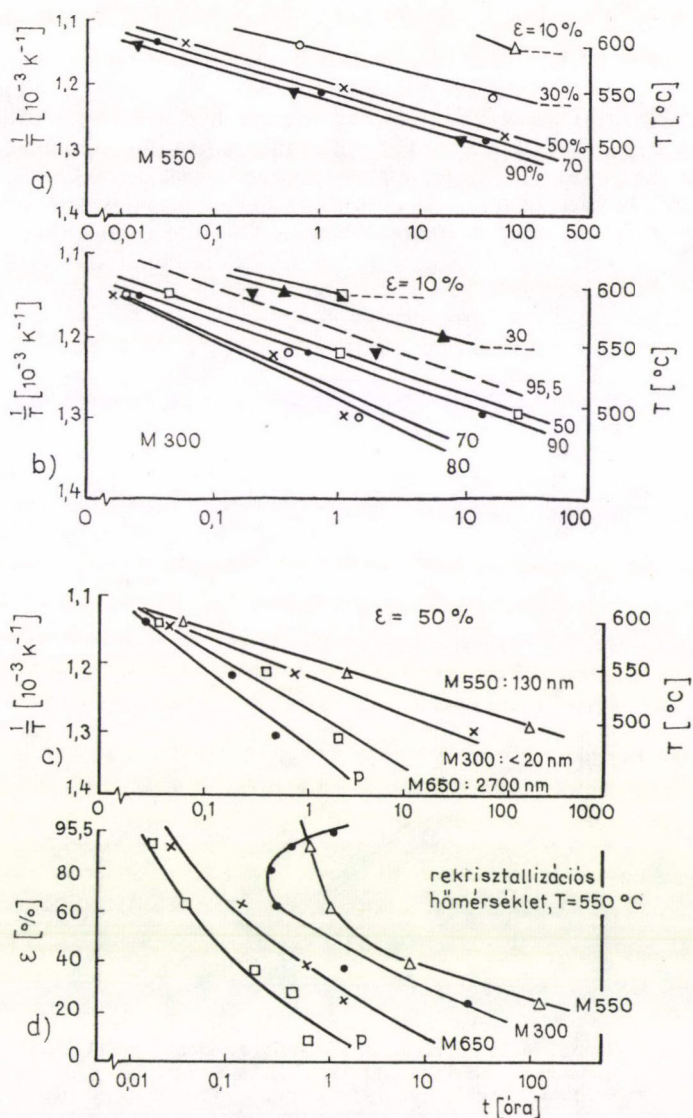
leációt gátolják. Közel fekvő részecskék akadályozzák a diszlokációk mozgásra-képes szemcsehatárokká történő átrendeződését. A második fázisú részecskék következtében fellép a 7. fejezetben tárgyalt p_z fékezőerő, amely a szemcsehatárok mozgását akadályozza. Ezeket a megállapításokat a 6. ábrán látható vázlat szemlélteti.



6. ábra. A diszperz részecskék hatása a rekristallizációra. a) Gyorsító hatás csak akkor lép fel, ha a részecskeméret elég nagy ahhoz, hogy helyi ráctorzulásokat okozzon ($r_p > r_{krit.}$); b) Ha a részecskeméret adott, egy kritikus deformáció szükséges a részecskék hatására létrejövő nukleációhoz ($\varepsilon > \varepsilon_{krit.}$)

A fenti törvényszerűségeket jól lehet alkalmazni olyan gyakorlatban fontos esetekben, amikor egy ötvözetben a második fázis térfogati hányada állandó, de a d_p részecskeméretet és így a részecskék közötti Δ_3 teret szisztematikusan változtatják a legkedvezőbb rekristallizációs és egyéb fizikai és mechanikai tulajdonságok elérése érdekében.

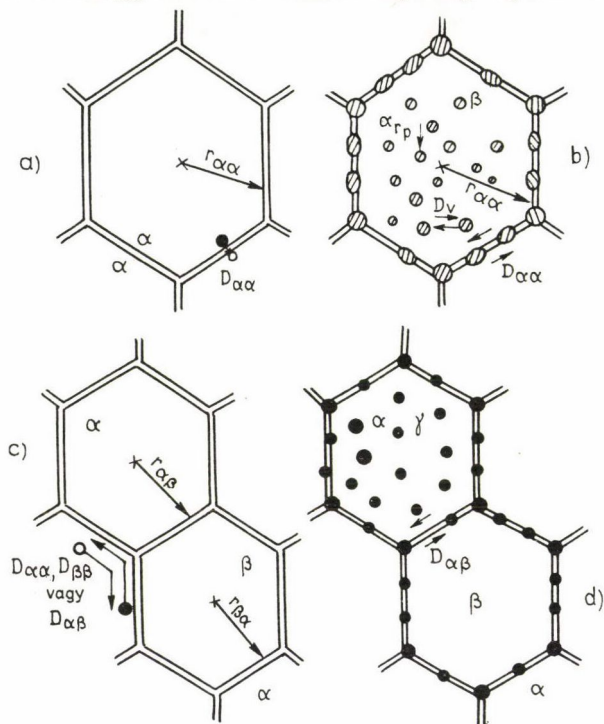
A kísérleti eredmények, különösen a nagyon kis méretű részecskék esetén azonban meglepő viselkedést mutatnak (7. ábra) [16]. A Fe-C rendszerben, amint várható, a nagyméretű karbid részecskék ($d_p = 2700$ nm) meggyorsítják a rekristallizációt, és ez a perlitesszerkezetekre is érvényes marad. A kisméretű részecskék ($d_p = 200$ nm) lassítják az újrakristályosodást, mivel a deformációs szerkezetet homogenizálják, így nem hoznak létre nukleációs helyeket és gátolják a rekristallizációs frontok mozgását. Azonban tovább csökkentve a részecske méretet (200×10 nm-es lemezek) nem a várt tendencia folytatódik. Kis és közepes mértékű deformációk esetén ($\varepsilon < 90\%$) a rekristallizáció korábban megkezdődik, mint a nagyobb részecskéket tartalmazó ötvözetek esetén. A mikroszkopikus vizsgálatok megmutatták, hogy ez annak a következménye, hogy a nagyon kis méretű karbid részecskék a deformáció alatt eltörnek és elnyíródnak, így inhomogén deformációs tér jön létre. Különösen a deformációs sávok átmetszése okoz nagy mértékű ráctorzulásokat tartalmazó zónákat és így nukleációs helyeket. Csak nagyon nagy mértékű alakítások esetén válik a deformáció újra homogénné és kezdődik hosszabb idő után a rekristallizáció, mint a nagyobb részecskéket tartalmazó ötvözetekben. Ilyen feltételek mellett a deformáció sebessége növekedhet (ahogy várható) a deformáció mértékének növekedtével, de csökkenni fog a nagyon kis részecskéket tartalmazó ötvözetek esetén.



7. ábra. A diszperz Fe_3C részecskék hatására a rekrisztallizáció kezdetére Fe+0,23s% C acélban (részecskeméret a c) ábrán). a), b) A rekrisztallizáció kezdetének hőmérséklet függése kis méretű, de nem deformált részecskék esetén (a), illetve kis méretű, de a deformáció közben elnyíródott részecskék esetén (b). c), d) Különböző karbid részecskék összehasonlítása (P \equiv perlit-ferrit szerkezet, M °C \equiv a martenzites temperálás hőmérséklete °C-ban); c) A rekrisztallizáció kezdetének hőmérsékletfüggése; d) A hidegalakítás mértékétől való függés

6. KÉTFÁZISÚ ÖTVÖZETEK SZEMCSENÖVEKEDÉSE

Ha egy ötvözetet magas hőmérsékleten alakítanak vagy gyakorlati célokra hasznosítanak, a rekrisztallizációval kialakult mikroszerkezet stabilitása fontossá válik. Az összes növekedési folyamat hajtóereje a felületi energia sűrűségéből származik, és ez a p_B hajtóerő a 7. fejezetben található (7) egyenletnek megfelelően fejezhető ki, ahol most a szemcseméretet jelöljük $r_{\alpha\alpha}$ -val. A reakció sebessége attól függ, hogy az atomi ugrások mekkorák (határvastagság nagyságrendűek vagy nagyobbak), és milyen típusú diffúziós folyamat zajlik le (határdiffúzió, $D_{\alpha\alpha}$ vagy $D_{\alpha\beta}$; csődiffúzió diszlokáció magok mentén, D_p ; térfogati diffúzió, D_v). Ennek alapján a növekedés időfüggésére a következő arányosságok jellemzőek (8. ábra) [17]:



8. ábra. Növekedési reakciók vázlatai: a) szemcsenövekedés; b) szemcsenövekedés második fázis jelenlétében; c) $\alpha + \beta$ duplex szerkezet növekedése; d) harmadik (γ) fázis által szabályozott duplex szerkezet növekedése

$$r_{\alpha\alpha} \sim (D_{\alpha\alpha} t)^{1/2} \quad (\text{rekriszt., szekund. rekriszt.}) \quad (4a)$$

$$r_{aa} \sim (D_{aa} t)^{1/2} \quad (\text{szemcsenövekedés}) \quad (4b)$$

$$r_p \sim (G_p t)^{1/3} \quad (\text{diszperz részecskék növekedése}) \quad (4c)$$

$$r_{\alpha\beta} \sim (D_{\alpha\beta} t)^{1/4} \quad (\text{duplex szerkezetek növekedése}) \quad (4d)$$

$$[7] (D_{\alpha, \beta} \gg D_v)$$

Megjegyezzük, hogy a $t^{1/2}$ -es törvény ritkán teljesül, amit az okoz, hogy a szennyezők a növekedés közben felhalmozódnak a szemcsehatárokon még nagy tisztaságú fémek esetén is. A duplex szerkezetek $t^{1/4}$ -es törvényét az okozza, hogy ekkor a diffúziós távolságnak a szemcseméret felel meg [7].

A hajtó- és fékezőerők egyensúlya a 7. fejezetben található (26) egyenletnek megfelelően határozza meg annak feltételét, hogy a részecskénövekedés mikor határozza meg a szemcsenövekedést. Ebből az egyenletből a mostani jelöléseinknek megfelelően meghatározható adott r_p részecskeméret mellett egy f^{krit} térfogati hányad:

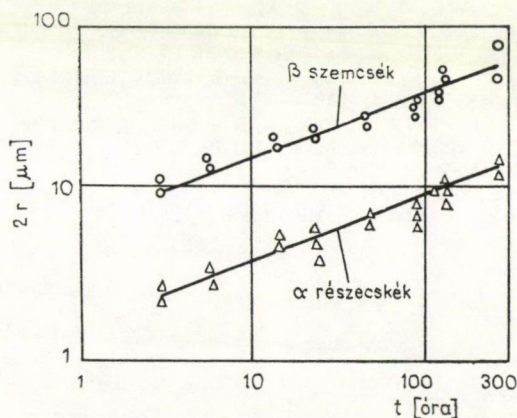
$$f^{\text{krit}} \cong A \frac{r_p}{r_{\alpha\alpha}}, \quad (5)$$

amely stabilizálja az adott $r_{\alpha\alpha}$ szemcseméretet. Ennek a feltételnek csak a szemcsehatár közelében kell teljesülnie, tehát ha a részecskék ott helyezkednek el, akkor ezt a feltételt már nagyon kis mennyiségű részecske is képes teljesíteni. Az (5) egyenletben A egységnyi nagyságrendű geometriai faktor, amely a részecskék alakjától, méreteloszlásától stb. függ.

Végül meg kell említeni, hogy szemcsenövekedés nem feltétlenül zérus, ha az (5) egyenletbeli feltételek teljesülnek, hanem a szemcsenövekedést a blokkoló részecskék növekedése határozza meg a következő módon:

$$r_{\alpha\alpha}^{\text{krit}}(t) = A \frac{r_p(t)}{f} = A^* \frac{(D_v t)^{1/3}}{f}. \quad (6)$$

Ha az $r_p(t)$ függvény ismert, akkor az így meghatározott szemcsenövekedés számítható. A 9. ábrán példát mutatunk az ilyen módon ellenőrzött szemcsenövekedésre, ahol a szemcsehatárokon levő α -Ti részecskék mérete határozza meg a β -Ti szemcsék növekedését. Az időfüggés kitevője $1/4 < m < 1/3$ azt jelenti, hogy határ és térfogati diffúzió együtt felelős a β -részecskék növekedéséért [18].



9. ábra. β szemcsék és α részecskék növekedése Ti-5.25s% Al-5.5s% V ötvözetben 885 °C-on

7. ÖSSZEFOGLALÁS

Ebben a fejezetben a kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációs viselkedését tárgyaltuk. Megvizsgáltuk, hogy túltelített szilárd oldatokban milyen módon befolyásolja egymást a rekrisztallizáció és a második fázisú részecskék kiválása. A precipitáció bizonyos esetekben lassítja, máskor meggyorsítja a rekrisztallizációs folyamatot. Ha egy ötvözetben nincsenek jelen mozgásra képes szemcsehatárok, akkor a meglevő rácshibák eltűnését kizárólag a kiválasztott részecskék képződése és oldódása szabályozza. Megvizsgáltuk az így létrejövő folytonos, vagy in-situ rekrisztallizációs folyamatok keletkezésének feltételeit és lejátszódásának mechanizmusait. Tárgyaltuk továbbá különböző paraméterek, így a hőmérséklet, a túltelítettség, a diszlokációs-sűrűség és a hőkezelési idő hatását a folytonos és a nemfolytonos rekrisztallizációs viselkedésre. Foglalkoztunk a diszperz részecskéket tartalmazó ötvözetek rekrisztallizációs tulajdonságaival, és megállapítottuk, hogy a diszperz részecskék milyen feltételek mellett képesek gyorsítani, illetve lassítani a rekrisztallizációt a részecskementes mátrix viselkedéséhez képest. Végül megvizsgáltuk, hogy a különböző precipitációs és rekrisztallizációs folyamatok a kétfázisú ötvözetek szemcse növekedésének milyen időfüggéseire vezetnek.

IRODALOM

1. R. W. Cahn, Recrystallization, Grain Growth and Textures, (ed. H. Margolin), ASM, Ohio, 1966. p. 109.
2. E. Hornbogen and H. Kreye, Texturen in Forschung und Praxis, (eds. f. Grewen and G. Wassermann), Springer, Berlin, 1969. p. 274.
3. U. Köster, Metal Sci. 8, 151, 1974.
4. E. Hornbogen, Fundamental Aspects of Structural Alloy Design, (ed. R. I. Jaffee), Plenum, New York, 1976, p. 389.
5. N. Hansen, Mem. Sci. Rev. Met. 72, 189, 1975.
6. P. Cotteril and P. R. Mould, Recrystallization and Grain Growth in Metals, Surrey Univ. Press, London, 1976.
7. E. Hornbogen and U. Köster, Recrystallization of Metallic Materials, ed. F. Haessner, Dr. Riederer-Verlag GmbH, Stuttgart, 1978. p. 159.
8. K. Holm and E. Hornbogen, J. Mat. Sci. 5, 655, 1970.
9. H. Ahlborn, E. Hornbogen and U. Köster, J. Mat. Sci. 4, 944, 1969.
10. H. Kreye and E. Hornbogen, J. Mat. Sci. 5, 89, 1970.
11. H. Kreye, E. Hornbogen and F. Haessner, phys. stat. sol. A1 97, 1970.
12. I. Kovács, J. Lendvai, T. Ungár, T. Turmezey and G. Groma, Acta Met. 25, 673, 1977.
13. H. P. Klein, Z. Metallkde. 61, 564, 1970.
14. J. L. Brimhall, M. J. Klein and R. A. Huggins, Acta Met. 14, 459, 1966.
15. L. M. Brown and W. M. Stobbs, Phil. Mag. 23, 1201, 1971.
16. C. Kamma and E. Hornbogen, J. Mat. Sci. 11, 2340, 1976.
17. E. Hornbogen, Metall, 29, 247, 1975.
18. E. Levine, I. Grenhut and H. Margolin, Met. Trans. 4, 2519, 1973.

11. NAGYSZÖGŰ SZEMCSEHATÁROK MOZGÁSA

JUHÁSZ ANDRÁS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	549
2. Kísérleti tapasztalatok	550
2.1. A határmozgás és a hajtóerő kapcsolata	550
2.2. A határmozgás hőmérsékletfüggése	550
2.3. A szomszédos szemcsék orientációviszonyainak, a határ szerkezetének és energiájának hatása a határmozgás sebességére	551
3. A nagyszögű szemcsehatárok mozgását értelmező modellek	553
3.1. A határmozgás visszavezetése atomi mozgásra	553
3.2. Csoportos atommozgást feltételező elméletek	554
3.3. Egyedi atommozgásra épülő elméletek	555
3.3.1. Turnbull modellje	555
3.3.2. A határmozgás lépcső modellje	555
3.3.3. A szemcsehatár-mozgás értelmezése vakanciák segítségével	556
3.3.4. A szemcsehatár-mozgás értelmezése diszlokációs modell alapján	557
4. Összefoglalás	558
5. Irodalom	558

1. BEVEZETÉS

A polikristályos fémek szemcseszerkezetének megváltozása a nagyszögű szemcsehatárok mozgásával következik be. A szemcsehatár-mozgás a primer újrakristályosodás, a normális szemcsenövekedés, a szekunder és tercier rekrisztallizációs folyamatokban alapvető jelentőségű [1].

A határmozgás törvényszerűségeinek feltárása részben a polikristályos fémek primer és szekunder újrakristályosodási folyamatainak vizsgálatával [2, 3], részben speciális bikristálymintákon végzett kísérletekkel történik [4, 5, 6]. A polikristályos fémek újrakristályosodását, vagy szemcsenövekedését vizsgálva sok határ-együttes mozgását érzékeljük, a kapott eredmények tehát a szemcsehatárok átlagos mozgástörvényeit tükrözik. A bikristálymintákon egy-egy adott határ mozgása közvetlenül tanulmányozható. A bikristályokon a határ két oldalon fekvő szemcsék orientációja, a szemcsehatár energiája, a határfelület geometriai adatai pontosan meghatározhatók. A bikristályokon nyert eredmények a nagyszögű szemcsehatárok mozgásának elméleti értelmezése szempontjából különösen jelentősek.

A jelen dolgozatban röviden összefoglaljuk a nagyszögű szemcsehatárok mozgására vonatkozó kísérleti eredményeket, majd ismertetjük a tiszta fémekben történő szemcsehatár-mozgást elméletileg értelmező modelleket.

2. KÍSÉRLETI TAPASZTALATOK

2.1. A határmozgás és a hajtóerő kapcsolata

A szemcsehatárok elmozdulása során a polikristály (bikristály) szabadentalpiája csökken. Ezt a szabad entalpiacsökkenést tekintjük a határmozgás P hajtóerejének. A hajtóerő nagysága lényegesen különbözik aszerint, hogy szemcsahatár-mozgás a primer vagy a szekunder újrakristályosodás során történik-e. A hajtóerők szerepének részletes tárgyalásával a jelen cikkgyűjtemény 7. fejezete foglalkozik.

Nagytisztaságú fémek esetén a nagyszögű szemcsehatár-mozgás sebessége arányos a hajtóerő nagyságával [3]:

$$v = M \cdot P, \quad (1)$$

ahol M a határra jellemző adat, az ún. mozgékonyosság.

Nem nagytisztaságú fémek és ötvözetek esetén a határmozgás sebessége és a hajtóerő között általában nincs lineáris kapcsolat. Ilyen esetekben v és P kapcsolata a

$$v = M^* \cdot P^k \quad (2)$$

hatványfüggvénnyel írható le. A szennyezők mennyisége és minősége a határmozgás sebességét M^* és k értékein keresztül befolyásolja [1].

2.2. A határmozgás hőmérsékletfüggése

A szemcsehatárok M mozgékonyága és ezen keresztül a határmozgás sebessége is exponenciálisan nő a hőmérséklet emelkedésével, azaz

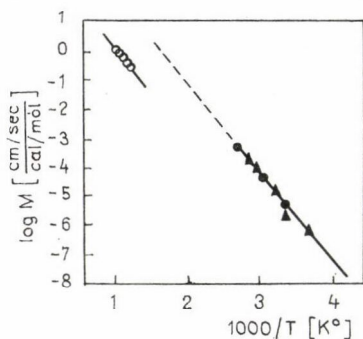
$$M = M_0 e^{-\frac{Q}{kT}}, \quad (3)$$

és

$$v = M_0 \cdot P \cdot e^{-\frac{Q}{kT}}, \quad (4)$$

ahol Q a határmozgást szabályozó termikusan aktivált folyamat aktiválási energiája.

Az 1. ábra a szemcsehatárok mozgékonyágának logaritmusát ábrázolja az abszolút hőmérséklet reciprokanak függvényében. A mérési eredmények nagytisztaságú alumíniumra vonatkoznak és több szerzőtől származnak [3, 7, 8]. A mérési pontok két párhuzamos egyenesre illeszkednek. Erre az ad magyarázatot, hogy az alacsonyabb hőmérsékletekhez tartozó sebességek rekristallizációs vizsgálatokból kapott átlagértékek, a magasabb hőmérsékletekhez tartozó adatok pedig egyes határok sebességének közvetlen meghatározásából



1. ábra. A szemcsehatár-mozgékonyosság logaritmusának és az abszolút hőmérséklet reciprokanak kapcsolata nagytisztaságú Al-ban (○ Aust és Rutter [7], ▲ Gordon és Vandermeer [8], ● Gordon és El-Bassouini [3])

származnak. A két párhuzamos egyenes meredekségéből a Q aktiválási energiára azonos érték, mintegy $14 \text{ kcal/mól} = 0,61 \text{ eV}$ adódik.

A termikusan aktivált folyamatok természetére jellemző a Q aktiválási energia értéke. Nagytisztaságú fémek esetén a nagyszögű szemcsehatár-mozgás Q aktiválási energiája körülbelül fele a kristály öndiffúziós energiájának, azaz a határmenti diffúzió aktiválási energiájával egyezik meg [7]. Átlagos tisztaságú fémekben a határmozgás energiája általában jóval magasabb az öndiffúziós energiánál, az olvadáspont közelében azonban a határmozgás aktiválási energiája lecsökken és a nagytisztaságú fémre kapott értékkel összemérhetővé válik [3, 7].

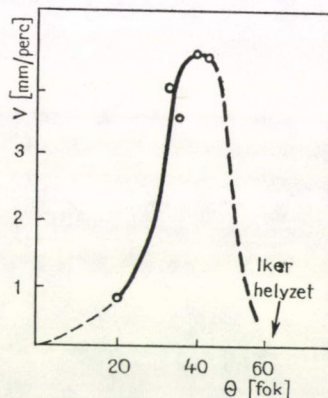
2.3. A szomszédos szemcsék orientációviszonyainak, a határ energiájának és szerkezetének hatása a határmozgás sebességére

A nagyszögű szemcsehatárok mozgásának sebességét a hajtóerőn és a hőmérsékleten kívül a határ két oldalán fekvő szemcsék orientációviszonya is befolyásolja.

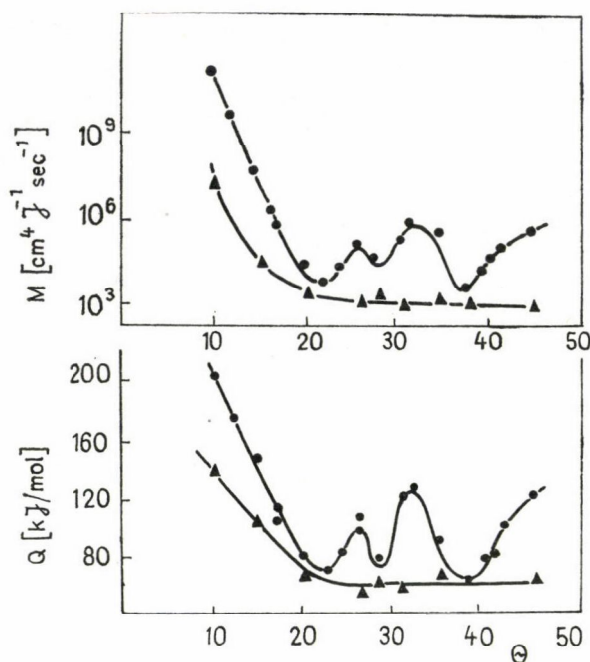
A kísérleti tapasztalatok szerint vannak olyan kitüntetett szemcsehatárok, melyeknek mozgékonyasága sokkal nagyobb, mint a többi határé. A különlegesen mozgékony határok általában az ún. „rendezett” szerkezetű határok közül kerülnek ki. A rendezett határok nagyszámú, mindkét szemcse kristályrácsához jól illeszkedő — koincidens — atomot tartalmaznak. A rendezett csavart és dőlt határok felületi energiája viszonylag alacsony. A felületen centrált köbös szerkezetű polikristályos fémekben különösen mozgékonyak például a 40° -os $\langle 111 \rangle$ csavart határok (2. ábra) és a 23° -os $\langle 100 \rangle$ dőlt határok [10]. A tércentrált köbös fémekben a 25 – 30° -os csavart határok mozgékonyasága nagy [11].

A kísérleti tapasztalatok szerint a rendezett és rendezetlen szemcsehatárok mozgékonyasága között a hőmérséklet emelkedésével csökken a különbség [12]. Ugyancsak eltűnik a különbség, ha az anyag különlegesen nagytisztaságú. A 3. ábra különböző tisztaságú alumíniumon végzett vizsgálatok eredményét mutatja [13].

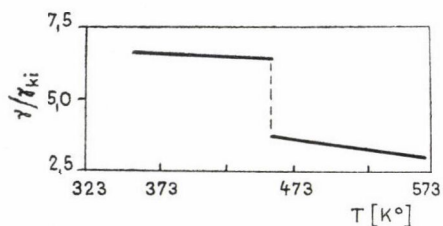
A nagyszögű szemcsehatárok energiájának és mozgékonyaságának kapcsolatát nagytisztaságú ólmon végzett méréseken mutatjuk be. A 4. ábra egy átlagos szemcsehatárnak a koherens ikerhatárhoz viszonyított relatív határenergiaját tünteti fel a hőmérséklet függvényében [14]. Az energia $T=485 \text{ K}$ -nál ugrásszerűen megváltozik. A határ felületi energiájának hirtelen lecsökkenése a határszerkezet gyors átalakulásával értelmezhető. Az 5. ábra a nagytisztaságú ólomban mért átlagos szemcsehatár-sebesség hőmérsékletfüggését szemlélteti [15]. A grafikon $1000/T=2,18$ értéknél (485 K hőmérsékletnél) megfigyelhető töréspontja a határmozgékonyaság hirtelen megváltozását jelzi. A mozgékonyaság megváltozása a 4. ábra grafikonja szerint a határban bekövetkező szerkezeti átrendeződés következménye.



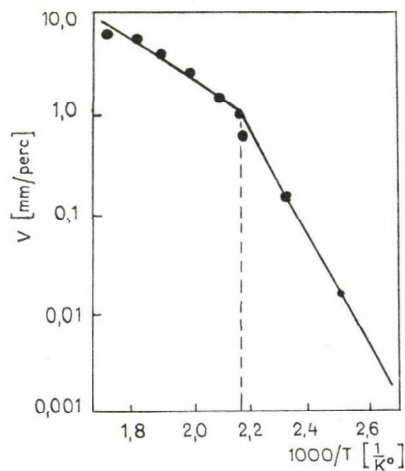
2. ábra. A határmozgás sebességének változása a szemcsék orientációeltérésének függvényében az $\langle 111 \rangle$ tengelyre vonatkoztatva nagytisztaságú Al-ban [9]



3. ábra. A $\langle 100 \rangle$ dőlt szemcsehatár aktiválási energiájának és a mozgékonyság M_0 faktorának változása a szemcsék közti orientációkülönbség függvényében (● 99,9992 at% Al, ▲ 99,9995 at% Al [12])



4. ábra. A koherens ikerhatárhoz viszonyított fajlagos szemcsehatár felületi energia változása a hőmérséklet függvényében nagytisztaságú ólom esetén [11]



5. ábra. Nagytisztaságú ólom szemcsehatármozgás-sebessége az abszolút hőmérséklet reciprokának függvényében [10]

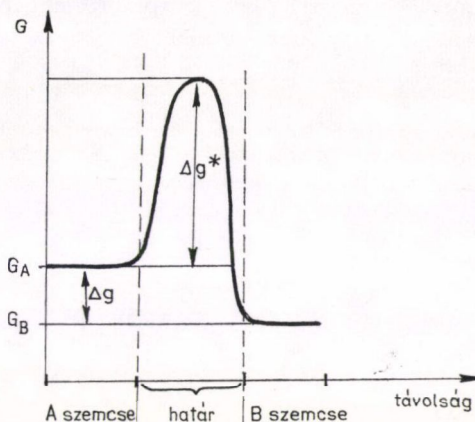
3. A NAGYSZÖGŰ SZEMCSEHATÁROK MOZGÁSÁT ÉRTELMEZŐ MODELLEK

3.1. A határmozgás visszavezetése atomok mozgására

A nagyszögű szemcsehatárok mozgását magyarázó elméletek közös vonása, hogy azok a határmozgást két szomszédos szemcse határrétegén keresztül történő speciális diffúziós folyamatként tárgyalják [1]. A szemcsehatár valamilyen irányú elmozdulása ugyanis mindig a határ mozgásával ellentétes irányú anyagáramlás következménye. A határ egyik oldalán levő szemcse kristályrácsáról leváló atomok a határrétegén átjutva a túloldali szemcse rácsába épülnek be.

Vizsgáljuk ezt a speciális diffúziós folyamatot két szomszédos — A és B — kristálszemcse esetén. A két szemcse és a határréteg szabadentalpia-viszonyait a 6. ábra szemlélteti. A két szomszédos szemcse szabadentalpiáját G_A , ill. G_B jelöli, a köztük levő határréteg magasabb szabadentalpiája potenciálgáttal választja el a két szemcséhez tartozó atomokat.

A szemcsehatáron keresztül történő anyagáramlás termikusan aktivált folyamat. A határfelületen mindkét irányban átléphetnek atomok, ha rendelkeznek a potenciálgát leküzdéséhez szükséges energiával. A 6. ábrán feltüntetett potenciálviszonyokat és a termikus energiafluktuációkat figyelembe véve az A szemcséből a B szemcsébe időegység alatt



6. ábra. A szabadentalpia-viszonyok sematikus ábrázolása két szemcse határán

$$n_1 = v \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}},$$

a B szemcséből az A szemcsébe pedig

$$n_2 = v \cdot e^{-\frac{\Delta g^* + \Delta g}{kT}}$$

atom lép át, ahol v az atomi rezgés frekvenciája. A határ eltolódásának sebessége az eredő anyagárammal arányos

$$v \sim (n_1 - n_2)$$

azaz

$$v = v\lambda \left[1 - e^{-\frac{\Delta g}{kT}} \right] \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}}, \quad (5)$$

ahol λ hosszúság dimenziójú arányossági tényező, amely a határ elmozdulását adja meg akkor, ha egyetlen atom az egyik szemcséből a másikba vándorolt. (λ számértéke kb. az atom átmérőjének felel meg.) Tiszta fémek esetén a szomszédos szemcsék Δg szabadentalpia különbsége elegendően kicsiny ahhoz, hogy teljesüljön a

$$\frac{\Delta g}{kT} \ll 1$$

feltétel, így az (5) összefüggés

$$v = v \cdot \lambda \cdot \frac{\Delta g}{kT} \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}} \quad (6)$$

alakúra egyszerűsödik.

A kísérleti tapasztalatok szerint a határmozgás sebessége arányos a hajtóerővel és exponenciális hőmérsékletfüggést mutat. A (6) összefüggést ezért célszerű úgy átírni, hogy a hajtóerőt explicit alakban tartalmazza. Ehhez a hajtóerő definíciós egyenletét a

$$P = \frac{\Delta g}{V_a}$$

alakban használjuk fel, ahol Δg a két szemcse egyetlen atomra vonatkoztatott szabadentalpia különbsége, V_a pedig az atom térfogata. Ezzel a

$$v = \frac{v\lambda V_a}{kT} \cdot P \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}} \quad (7)$$

egyenlethez jutunk, amely a kísérleti eredményeket leíró (4) összefüggéssel közvetlenül összehasonlítható.

A nagyszögű szemcsehatárok mozgását kvantitativ értelmező elméletek közös kiindulópontja a (7) összefüggés. Az egyes modellek csak a határszerkezetre és az anyagtranszport mechanizmusára tett feltételezésekben különböznek egymástól. Az utóbbi alapján szokás az elméleteket két nagy csoportba sorolni. Az első csoportba azok a modellek tartoznak, amelyek a határmozgást több atom kollektív mozgásának tekintik, a másik csoport modelljei az atomok egyedi mozgására épülnek.

3.2. Csoportos atommozgást feltételező elméletek

Az első, csoportos atommozgást feltételező elmélet *Mott* nevéhez fűződik [16]. *Mott* feltételezte, hogy a nagyszögű szemcsehatárok atomi szerkezete a túlűtött folyadékokéval azonos. Kísérleti tapasztalat, hogy átlagos tisztaságú fémek esetén a határmozgás Q aktiválási energiája jóval meghaladja az öndiffúziós energia értéket. *Mott* erre a megfigyelésre támaszkodva feltételezte, hogy a szemcsehatár mozgása során egész atomcsoportok egyidejű aktiválásáról van szó. Elképzelése szerint az egyik szemcse határmenti tartománya lokálisan megolvad, így a szemcsehatár ezen oldal felé kitolódik. Ezzel egyidőben a túlűtött folyadékhoz hasonló szerkezetű határ túloldalán az atomok egy más csoportja aktiválódik és beilleszkedik a másik szemcse kristályrácsába. *Mott* elmélete szerint tehát a (7) egyenletben Δg^* helyére ig_0 helyettesítendő, ahol i az aktiválódó atomok száma, g_0 a kristály egy atomjára jutó kötési energia; λ helyére pedig $i\lambda$ kerül.

Mott elméletét *Smoluchowski* [17] fejlesztette tovább, úgy, hogy a modell magyarázatot adjon a határmozgás sebességének és a szomszédos szemcsék orientációs viszonyainak összefüggésére is. *Smoluchowski* a határmozgás Δg^* aktiválási energiáját *Mott*-tól eltérő módon értelmezi. Véleménye szerint ugyanis az i db atomból álló csoport aktiválásához nem szükséges a teljes kötési energia, mivel a határszerkezet atomjai extra felületi energiával rendelkeznek. A határmozgás aktiválásához

szükséges energia a kötési energia és az i db atom által a határfelületben képviselt felületi energia különbsége:

$$\Delta g^* = i g_0 - C i \lambda^2 \cdot \gamma, \quad (8)$$

ahol γ a szemcsehatárfelület fajlagos energiája, λ egy atom átmérője, C arányossági tényező. A szemcsehatár γ fajlagos felületi energiája a két szomszédos szemcse orientáció különbségétől és a határfelület helyzetétől függ.

Mott és Smoluchowski elméletével jól értelmezhetők Anderson és Mehl tiszta rézre vonatkozó eredményei [18], valamint Beck és munkatársai által alumíniumon [19], ill. Burke átlagos tisztaságú α -bronzon [20] végzett mérései.

3.3. Egyedi atommozgásra épülő elméletek

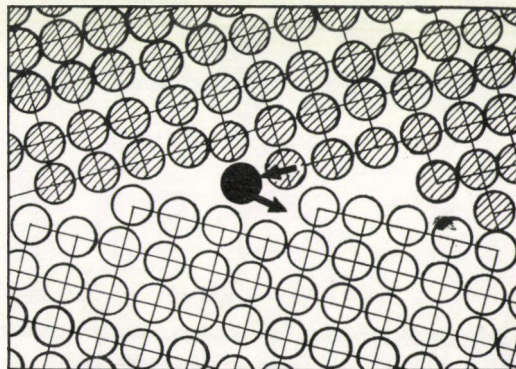
3.3.1. Turnbull modellje

A szemcsehatárok mozgását egyes atomok mozgására visszavezető számításokat elsőnek Turnbull végzett [21]. Turnbull a (7) összefüggést vette alapul. Feltételezte, hogy minden, a két szomszédos szemcse határán elhelyezkedő atom termikusan aktiválódhat és eredeti helyéről kiszakadva a határ túloldalán levő szemcséhez csatlakozhat. Számításai során Turnbull a Δg^* aktiválási szabadentalpia helyére a határmenti diffúzió aktiválási energia értékét helyettesítette. (A szemcsehatármenti diffúzió aktiválási energiája mintegy fele a kristály öndiffúziós energiájának.) Az így kapott eredményei általában jó egyezést mutatnak a nagytisztaságú fémeken mért adatokkal [7, 8, 3, 22–25].

3.3.2. A határmozgás lépcső modellje

Gleiter a határmozgás elméletét nagytisztaságú felületen centrált köbös (fck) szerkezetű fémekre vonatkozó kísérleti eredményekre alapozta [26]. A kísérleti tapasztalatok szerint a nagytisztaságú fck fémekben a szemcsehatár-mozgás sebessége erősen orientációfüggő, a szemcsehatárok felülete jellegzetes lépcsős szerkezetű, és a lépcsőket a szemcsék szoros illeszkedésű $\{111\}$ síkjainak a szemcsehatárral való metszései alkotják. Elektronmikroszkópos „in situ” megfigyelések szerint a szemcsehatárok mozgása a lépcsők spirális kiépülésével történik. Ez a folyamat a folyadék, vagy gőzfázisból történő kristályosodás mechanizmusára emlékeztet.

A határmozgás Gleiter szerint a következő atomi lépések sorozatával történik. A hajtóerő hatására összehúzódozó szemcse oldalán az egyik felületi lépcső éléről leszakad



7. ábra. A szorosilleszkedésű $\{111\}$ síkok által alkotott lépcsőkből felépülő szemcsehatár két dimenzióban

egy atom, keresztül diffundál a határon, majd a határ túloldalán abszorbeálódva továbbépíti a szomszéd szemcse egyik lépcsőjét (7. ábra). Így a határ mozgékonyaságáért a szemcsehatár lépcsők felelősek. Gleiter modellje szerint a határmozgás sebessége a következő összefüggésből számolható:

$$v = \frac{v \cdot \lambda V_a}{kT} \cdot P \cdot \psi \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}}, \quad (9)$$

ahol Δg^* egy atom leszakadásához és határmenti diffúziójához szükséges aktiválási szabadentalpia, ψ pedig a diffúzióra képes atomok hányadát megadó faktor. ψ -t a szomszédos szemcsehatárok f_1 és f_2 lépcsősűrűsége és a határréteg δ szélessége szabja meg:

$$\psi = \frac{\lambda}{\delta} \left[1 + \frac{1}{\delta} \left(\frac{1}{f_1} + \frac{1}{f_2} \right) \right]^{-1}$$

Gleiter modellje jó egyezést mutat az fcc szerkezetű fémek speciális dőlt és csavart szemcsehatáraival kapcsolatos megfigyelésekkel [27, 28, 29].

Az (111) dőlt határok nagyobb mozgékonyasága az (111) csavart határokhöz képest a nagyobb lépcsőkoncentrációval megmagyarázható. Gleiter modellje alapján érthető, hogy tökéletesen rendezett (mindkét szomszédos szemcséhez jól illeszkedő atomokat tartalmazó) kis energiájú koherens ikerhatárok gyakorlatilag rögzítettek, nem mozognak. A koherens ikerhatárok felülete ugyanis párhuzamos az {111} síkkal, a határ nem tartalmaz lépcsőket, ezért zérus a mozgékonyasága.

3.3.3. A szemcsehatár-mozgás értelmezése vakanciák segítségével

A kísérleti tapasztalatok szerint a szemcsehatár-mozgás felgyorsul, ha a mintát neutronsugárzásnak teszik ki [30]. A jelenség megmagyarázható, ha elfogadjuk, hogy a szemcsehatárokból a sugárzás hatására növekszik a lyukak száma. A „porózusabbá” vált határon keresztül meggyorsul az atomok diffúziója. A határmozgás „vakancia modellje” [31] szerint a kristályszemcsének csak azok a szélső atomjai aktiválódhatnak (szakadhatnak ki eredeti helyükről és juthatnak el a határ túloldalán fekvő szemcséhez), amelyek közvetlen szomszédságában a határ vakanciát tartalmaz. A szemcsehatárban lévő lyukaknak tehát szemcsehatár lépcsőkhöz hasonlóan az a szerepük, hogy megszabják a határmozgást kiváltó mozgóképes atomok hányadát. A vakancia modell szerint a határmozgás sebessége a következő kifejezéssel adható meg:

$$v = v \cdot \lambda \cdot \frac{\Delta g}{kT} \cdot C_v \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}}, \quad (10)$$

ahol C_v a határbeli vakanciakoncentrációt jelöli; Δg^* egy rácsatomnak a szomszédos vakanciába történő átugrásához szükséges energia.

A határmozgás vakanciamodellje a kísérleti eredmények kvantitatív értelmezéséhez nehezen használható. A szemcsehatár vakanciakoncentrációja ugyanis nem egyenlélyi érték és a mozgás folyamán változik.

3.3.4. A szemcsehatár-mozgás értelmezése diszlokációs modell alapján

A kisszögű szemcsehatárok szerkezete és energiaviszonyai jól leírhatók egymáshoz rendezett diszlokációk segítségével. A nagyszögű szimmetrikus dőlt határok leírására Li [32] a kisszögű határok esetén bevált diszlokációs modell egy alkalmasan továbbfejlesztett változatát javasolta. Eszerint a nagyszögű dőlt határok esetén is diszlokációfalakkal értelmezhető a szemcsék közötti orientációeltérés. Itt azonban az egymás fölé rendezett diszlokációk már olyan közel kerülnek egymáshoz, hogy többé már nem tekinthetők egymástól függetlennek. Li számításai szerint a $\theta > 35^\circ$ -os orientációeltérés esetén a diszlokációk központi üregei gyakorlatilag már összeérnek.

A szemcsehatárok mozgása Li modellje alapján a következőképp értelmezhető. A szemcsehatárt alkotó diszlokációüregekben az egyik szemcséből olyan könnyen diffundálhatnak atomok a másik szemcsébe, hogy e mellett a határ többé-kevésbé rendezett tartományán keresztül történő diffúzió elhanyagolható.

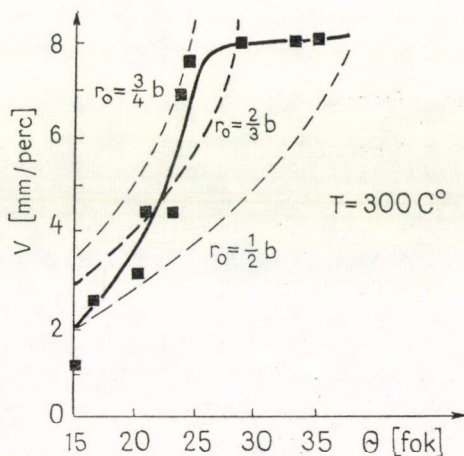
A határmozgás sebessége tehát

$$v = v_0 \cdot \lambda \cdot \frac{\Delta g}{kT} \cdot \sigma \cdot e^{-\frac{\Delta g^*}{kT}} \quad (11)$$

alakban írható fel, ahol σ az egységnyi határfelületnek a diszlokációüregek alkotta effektív hányadát jelenti. A folyamat Δg^* aktiválási szabadentalpiája azonosnak vehető a diffúziós kísérletekből meghatározott szemcsehatármenti diffúzió aktiválási energiájával. (Δg^* értékének ilyen megadása azonban csak közelítés, mert a szemcsehatár-diffúzió a határ felülete mentén történő atommozgást jelent, a szemcsehatármozgás pedig a határfelületre merőleges diffúzió következménye.)

A modell feltételezései szerint a szomszédos szemcsék adott orientációkülönbsége megadja a határban található diszlokációüregek számát. A hőmérséklet növekedésével az aktiválódó atomok száma nő és ezek fokozatosan telítik a könnyű diffúzió lehetőségét biztosító diszlokációüregeket. A telítődés után a határmozgás sebessége már nem növekedhet tovább. Mivel a Li-elmélet szerint a határmozgásnak ez a mechanizmusa maximálja a határmozgás sebességét, a modellt gyakran telítődési modellnek is nevezik.

A Li-féle diszlokációs modell- és a kísérleti eredmények összehasonlító vizsgálatával Rutter és Aust [33] foglalkozott. Az $\langle 100 \rangle$ dőlt határmozgási sebességének kísérleti adatait és a modell alapján számolt értékeket a 8. ábrán a θ dőlési szög függvényében mutatjuk be. Az elméleti számításokban a diszlokáció üreg r_0 sugarára különböző feltételezéseket használtak, ezen értékeket a számított görbék mellett feltün-



8. ábra. $\langle 100 \rangle$ dőlt határ sebességének változása a dőlési szög függvényében nagytisztaságú ólom-ban. A mérési pontokra illesztett folytonos vonallal kihúzott görbe mellett szaggatottan jelöltük be a határok sebességének a Li-modell alapján (különböző r_0 sugarú diszlokációüregeket feltételezve) számított értékeit (Rutter és Aust [33] után)

tettük. A mért és számított görbék a $15^\circ < \theta < 30^\circ$ tartományban jól illeszkednek, bár a mérési adatok szerint a határmozgás sebessége gyorsabban változik, mint ahogy az az elmélet alapján adódna.

A kísérleti tapasztalatok szerint a Li-elmélet csak elegendően magas kísérleti hőmérsékletek esetén használható, ahol már elhanyagolható a nagytisztaságú anyagokban is nyomokban meglevő szennyezők hatása.

4. ÖSSZEFOGLALÁS

A nagyszögű szemcsehatárok mozgástörvényeinek feltárása mind elméleti, mind a gyakorlati szempontból egyaránt érdekes. A témával foglalkozó kiterjedt kutatómunka ellenére ezideig még nem sikerült olyan egységes elméletet találni, amelynek segítségével a határmozgásra vonatkozó kísérleti tapasztalatok maradéktalanul értelmezhetők.

Jelen dolgozat a legfontosabb kísérleti eredmények áttekintése után azokat az ismertebb modelleket tárgyalja, amelyek — tiszta fémek esetén — a kísérleti tapasztalatokkal többé-kevésbé megegyező eredményeket szolgáltatnak. Valamennyi modell közös vonása, hogy a határmozgást a szemcsehatáron keresztül történő diffúziós atomi mozgásra vezeti vissza. A diffúzió sebességét, azaz a határmozgást döntően a szemcsehatár atomi struktúrája határozza meg. Az egyes elméletek közötti különbségek elsősorban a határ szerkezetére tett eltérő feltételezésekből adódnak. Joggal remélhető, hogy a nagyszögű szemcsehatárok szerkezetének megismerésével sikerül a határmozgás sokrétű jelenségkörét is egységesen értelmezni.

IRODALOM

1. F. Haessner (ed.): Recrystallization of Metallic Materials, Dr. Rieder-Verlag GmbH. Stuttgart, 1978.
2. Rajkovits Zs., Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 26, 45, 1975.
3. P. Gordon and R. A. Vandermeer: Recrystallization, Grain Growth and Textures, American Society for Metals, Ohio, 1966.
4. J. W. Rutter and K. T. Aust, Acta Met. 13, 181, 1965.
5. R. C. Sun and C. L. Bauer, Acta Met. 18, 635, 1970a.
6. B. B. Rath and H. Hu, Trans A. I. M. E. 245, 1577, 1969b.
7. K. T. Aust and Rutter J. W.: Ultra-High Purity Metals American Society for Metals, Ohio, 1962.
8. P. Gordon and R. A. Vandermeer, Trans A. I. M. E. 224, 917, 1962.
9. B. Liebmann and K. Lücke, J. Metals 8, 1413, 1956.
10. M. May and F. Erdmann-Jesnitzer, Z. Metallk. 51, 567, 1960.
11. J. O. Stiegler, C. K. H. Dubose, R. E. Reed and C. J. McHargul, Acta Met. 11, 851, 1963.
12. K. T. Aust and J. W. Rutter, Trans A. I. M. E. 215, 820, 1959.
13. E. M. Friedman, T. W. Kopeckii, L. S. Shvindlerman, Z. Metallk. 66, 533, 1975.
14. H. Z. Gleiter, Metallk. 61, 282, 1970.
15. K. T. Aust, Interfaces Conference, Melbourne, (ed. R. C. Gifkins) Butterworths, London, 1969.
16. N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. 60, 391, 1948.
17. R. Smoluchowski, Phys. Rev. 83, 69, 1951.
18. W. A. Anderson and R. F. Mehl, Trans. A. I. M. E. 161, 140, 1945.

19. *P. A. Beck, M. L. Holzworth and H. Hu*, Phys. Rev. 73, 526, 1948.
20. *J. E. Burke and D. Turnbull*, Prog. Met. Phys. 3, 220, 1952.
21. *D. Turnbull*, Trans. A. I. M. E. 191, 661, 1951.
22. *K. T. Aust and J. W. Rutter*, Trans. A. I. M. E. 215, 820, 1959.
23. *G. F. Bolling*, Trans. T. M. S.—A. I. M. E. 239, 193, 1967.
24. *C. J. Simpson, K. T. Aust and W. C. Winegard*, Met. Trans. 2, 987, 1971a.
25. *C. J. Simpson, K. T. Aust and W. C. Winegard*, Met. Trans 2, 993, 1971b.
26. *H. Gleiter*, Acta Met. 17, 565, 1969.
27. *S. Kohara, M. N. Parthasarathi and P. A. Beck*, J. Appl. Phys. 29, 1125, 1958.
28. *M. Cook and T. L. J. Richards*, Inst. Met. 70, 159, 1944.
29. *P. A. Beck*, Metal Interfaces, A. S. M. Symposium 1952. p. 208., A. S. M., Cleveland.
30. *F. Haessner and H. P. Hobzer*, Acta Met. 22, 695, 1974.
31. *M. Feller-Kniepmeier and K. Schwartzkopf*, Acta Met. 17, 497, 1969.
32. *J. C. M. Li*, Appl. Phys. 32, 525, 1961.
33. *J. W. Rutter and K. T. Aust*, Acta Met. 13, 181. 1965.

12. SZEKUNDER REKRISZTALLIZÁCIÓ

ILLY JUDIT

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	561
2. Szemcsenővekedés	562
2.1. A folyamat hajtóereje	562
2.2. A folyamat sebessége	563
2.3. A hajtóerő és a sebesség kapcsolata	563
2.4. Normális szemcsenővekedés	563
2.5. Abnormális szemcsenővekedés	565
3. Szekunder rekrisztallizációt előidéző hatások	565
3.1. Második fázisú részecskék hatása	565
3.2. Oldott atomok hatása	567
3.3. A textura hatása	568
3.4. A mintavastagság hatása	569
4. Tercier rekrisztallizáció	571
5. A szekunder rekrisztallizáció gyakorlati alkalmazása	572
6. Összefoglalás	572
7. Irodalom	573

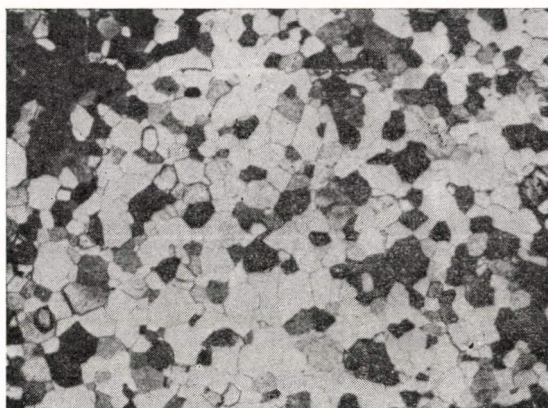
1. BEVEZETÉS

A primer rekrisztallizációs folyamatot követően további hőkezelések hatására az anyagban újabb szerkezetváltozás következik be. A primer szerkezet egyes kitüntetett szemcséi gyors növekedésnek indulnak és szomszédaikat magukba olvasztva az átlagos nagyság sokszorosát érhetik el. Ez a folyamat a szekunder rekrisztallizáció, amelynek időfüggését a primer rekrisztallizációhoz hasonlóan az

$$X = 1 - \exp(-At^k) \quad (1)$$

Avrami-egyenlettel írhatjuk le, ahol X a szekunder szemcsék hányada, A és k pedig kísérletileg meghatározható állandók [1]. Az 1. ábrán egy primer és egy szekunder rekrisztallizációs szerkezetet láthatunk.

Mielőtt rátérünk a szekunder rekrisztallizáció részletesebb vizsgálatára, először röviden áttekintjük a szemcsenővekedési folyamat főbb jellemzőit.



1. ábra. a) Primer rekrisztallizációs szerkezet,
b) szekunder rekrisztallizációs szerkezet

2. SZEMCSENÖVEKEDÉS

2.1. A folyamat hajtóereje

A szemcsenövekedés során az egységnyi térfogatra eső szemcsehatár-felület csökken és így a térfogategységre eső szemcsehatár-energia formájában tárolt szabadentalpia csökken. A szemcsenövekedés hajtóereje (vö.: 7. és 8. fejezet) az egységnyi térfogatra eső többlet-szabadentalpia:

$$P = \frac{\Delta g}{V} = S \cdot \gamma \cdot \eta \cdot \frac{1}{\bar{D}}, \quad (2)$$

ahol S az egységnyi térfogatra eső szemcsehatár-felület, γ a szemcsehatárok egységnyi felületre eső szabadentalpiája, \bar{D} az átlagos szemcseméret és η egy geometriai faktor, melynek értéke 1 és 3 közé esik [8].

2.2. A folyamat sebessége

A szemcsék növekedését nyomon követhetjük optikai mikroszkóp segítségével. A szemcsék átmérőjét az idő függvényében mérve meghatározható a szemcsenövekedés sebessége:

$$v = \frac{d\bar{D}}{dt}. \quad (3)$$

Izoterm hőkezelés során a szemcsenövekedés kinetikáját a Beck által javasolt empirikus szemcsenövekedési törvény írja le [2]:

$$D - D_0 = (at)^n, \quad (4)$$

ahol az n kitevő értéke a kísérleti eredmények szerint 0,5 vagy annál kisebb, D_0 a kezdeti szemcseméret. Az a paraméter tartalmazza a folyamat hőmérséklet-függését:

$$a = a \cdot e^{-Q/kT}, \quad (5)$$

ahol Q a folyamat aktiválási energiája.

2.3. A hajtóerő és a sebesség kapcsolata

A szemcsenövekedési sebesség és a hajtóerő közötti összefüggést kísérletileg nehéz meghatározni, mert a hajtóerőt közvetlenül nem tudjuk mérni. A viszonylag kis hajtóerők értékét sok külső paraméter is befolyásolhatja, pl. a hűtési, fűtési körülmények, a hőkezeléshez alkalmazott közeg, vagy felületi hatások (termikus barázdák).

A (2)–(4) összefüggések segítségével a hajtóerő és a sebesség kapcsolatára elméletileg a következő formula adódik:

$$\bar{v} \sim p^{\frac{1}{n}-1}. \quad (6)$$

2.4. Normális szemcsenövekedés

A (6) összefüggésből azonnal látható, hogy ha n értéke 0,5, akkor a sebesség és a hajtóerő között lineáris kapcsolat van:

$$v = m \cdot p, \quad (7)$$

ahol m a szemcsehatárok mozgékonyasága. Ebben az esetben a szemcsenövekedés időfüggését a

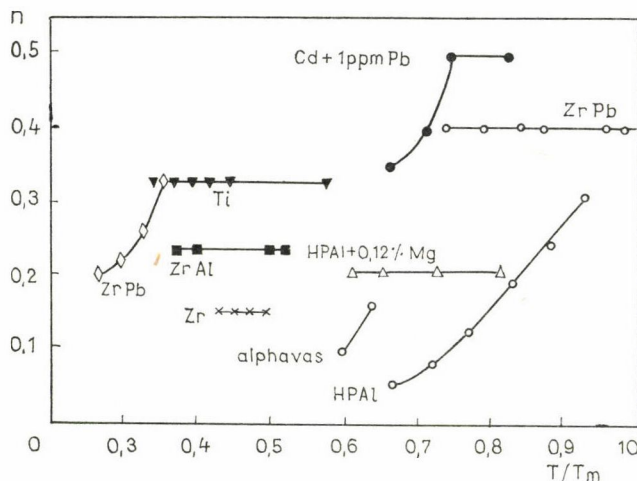
$$\bar{D}^2 - \bar{D}_0^2 = a(t - t_0) \quad (8)$$

normális szemcsenövekedési törvény írja le, ahol figyelembe vettük a \bar{D} , t_0 kezdeti értékeket is.

A normális szemcsenövekedési törvény csak az átlagos szemcseméretre érvényes, az egyedi szemcsék méretváltozása természetesen ennél sokkal bonyolultabb. *Feltham* [3] és *Hillert* [4] részletesen elemezte a szemcsenövekedési folyamatot az egyes szemcsék változásán keresztül. Az általuk levezetett összefüggések összhangban vannak

a (8) törvénnyel. Megállapították továbbá, hogy a szemcsék méretének eloszlása lognormal eloszlást követ. Általában normális, vagy egyenletes szemcsenövekedésről akkor beszélünk, ha a felületi energia csökkenés hatására a lognormal eloszlást megőrizve S csökken.

Novikov az egyes szemcsék változását számítógépes szimulációval követte nyomon. A szomszédos szemcsék kölcsönhatásának elemzésével különböző kezdeti paraméterek mellett (D_0 , kezdeti szemcseméret-eloszlás), különböző hőmérsékleteken minden időpillanatra meghatározta a szemcseméreteloszlást. A következőket állapította meg: a normális szemcsenövekedési törvény nem minden esetben írja le jól az átlagos szemcseméret változását, nagyobb kezdeti szemcseméret esetén a növekedés lassúbb és a növekedés kinetikáját a kezdeti szemcseméreteloszlás is befolyásolja [5].



2. ábra. Az n időexponens hőmérsékletfüggése izoterm szemcsenövekedés esetén

Idegen atomokat tartalmazó anyagokban a tapasztalat szerint az n kitevő értéke 0,5-nél kisebb, és nagysága a hőmérséklettel és a tisztasággal a 2. ábra szerint változik [6]. A (6) összefüggésből látható, hogy n ilyen értéke mellett a sebesség és a hajtóerő között nem lesz lineáris a kapcsolat. Ez annak tulajdonítható, hogy az idegen atomok jelenléte akadályozza a szemcsehatár szabad mozgását, azaz p' fékezőerő lép fel. A (7) kifejezés ekkor a következőképpen módosul:

$$v = m(p - p'). \quad (9)$$

Ha feltesszük, hogy a fékezőerő nem függ az időtől, akkor a (9) kifejezés, valamint a $\bar{v} \sim \frac{d}{dt} \bar{D}$ és a $p \sim D^{-1}$ összefüggések segítségével az átlagos szemcseméret változása a következő differenciálegyenlettel írható le [7]:

$$\frac{1}{\bar{D}(t)} = \frac{1}{m^*} \cdot \frac{d}{dt} \bar{D}(t) + \mu^*, \quad (10)$$

ahol m^* a mozgékonyssággal, μ^* pedig a fékezőerővel arányos. Az egyenlet megoldása

$$t = \frac{1}{m^* \mu^{*2}} \left\{ \frac{1 - \mu^* \bar{D}}{1 - \mu^* \bar{D}_0} + \mu (\bar{D} - \bar{D}_0) \right\} \quad (11)$$

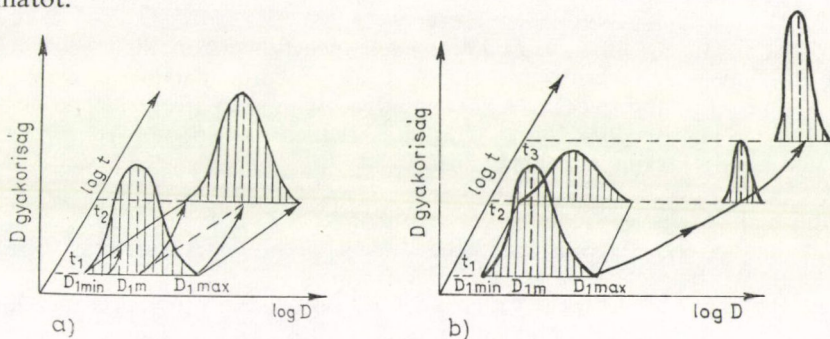
alakú, ahol $\bar{D}_0 = \bar{D}(t=0)$.

2.5. Abnormális szemcsenövekedés

Ha az anyag oldott atomokat, kiválásokat tartalmaz, ill. ha a minta erősen textúrás, vagy túl vékony, a szemcsék nem növekednek egyformán. Néhány kitüntetett szemcse gyors növekedésnek indul az erre nem képes többi szemcse rovására. Abnormális szemcsenövekedés valósul meg, melynek eredményeképpen inhomogén rekrisztallizációs szerkezet jön létre (1b. ábra). Ez a folyamat a szekunder rekrisztallizáció, melyet nem lehet a normális szemcsenövekedéssel leírni. A kitüntetett, növekedésre képes szemcséket szekunder szemcséknek nevezzük.

A szemcseméret-eloszlás időbeni változása a normális, illetve az abnormális szemcsenövekedés során nagyon különböző. A normális szemcsenövekedés folyamán minden egyes szemcse növekszik, a méreteloszlás időben nem változik. Más a helyzet az abnormális növekedés esetén. A kezdeti lognormal eloszlás a szekunder szemcsék növekedtével két részre szakad, a növekvő és a növekedésre nem képes szemcséknek megfelelően. Elegedően hosszú idő után azonban csak a szekunder szemcsék maradnak meg, mivel addigra már az összes többi magukba olvasztották (3. ábra).

A továbbiakban részletesen megvizsgáljuk, hogy a fent említett normális szemcsenövekedést fékező hatások miatt és hogyan idézik elő a szekunder rekrisztallizációs folyamatot.



3. ábra. A szemcseméreteloszlás időbeni változása a) folyamatos, b) nem folyamatos szemcsenövekedés esetén

3. SZEKUNDER REKRISZTALLIZÁCIÓT ELŐIDÉZŐ HATÁSOK

3.1. Második fázisú részecskék

A MnS kiválásokat tartalmazó FeSi3% ötvözetben a szemcsék durvulása egy bizonyos méret elérése után megáll (4. ábra). A MnS részecskék befolyásolják a szemcsehatárok mozgását és ezáltal a szemcsenövekedést is [8].

A második fázisú részecskék szemcsenövekedést gátló hatását a következőképpen magyarázhatjuk.

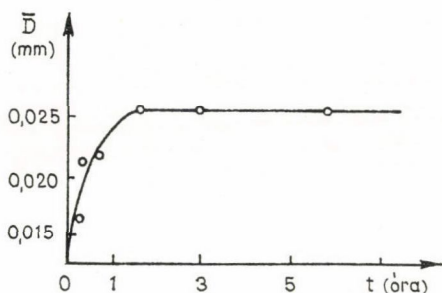
Ha egy szemcsehatáron második fázisú részecske ül, akkor a szemcsehatárnak a részecskéről való kimozdítása során akkora szemcsehatár-felületet kell kelteni, mint amekkora a második fázisú részecske keresztmetszete volt. Az új felület megjelenése azonban szabadenergia-növekedést jelent. Így folyamatos mozgás csak akkor jöhet létre, ha a hajtóerő fedezni tudja az új felület létrehozásához szükséges, egységnyi térfogatra jutó energiaszükségletet (vö. 12. képlet).

Az akadály leküzdésére befektetett Δg_i energia a következőképpen adható meg (7. fejezet):

$$\frac{\Delta g_i}{V} = \eta_1 \gamma_B \frac{f}{d_i}, \quad (12)$$

hol d_i a részecskék átmérője, f a részecskék térfogati hányada és η_1 geometriai faktor, amelynek értéke egy és kettő között van. Ha Δg_i megegyezik Δg -vel, akkor

4. ábra. Szemcsenövekedés MnS részecskéket tartalmazó FeSi3 %-ban 800 °C-on



a folyamatos szemcsenövekedés leáll, mivel ekkor a hajtóerő nullává válik. A (2), (10) összefüggéseket alkalmazva a maximális szemcseméretre a következő kifejezés adódik:

$$D_{\max} = \eta \eta_1 \frac{d_i}{f}. \quad (13)$$

A kísérletek során $d_i \sim 10^{-6}$ m, $f=1\%$ értékek mellett a maximális szemcseméretre $10 - 20 \cdot 10^{-6}$ m adódott, ami jól megegyezik a 4. ábráról leolvasható értékkel [8].

A második fázisú részecskék tehát akadályozzák a normális szemcsenövekedést, ami szekunder rekrisztallizációhoz vezet. Kísérletileg Al-Mn ötvözetben mutatták ki először, hogy a szekunder rekrisztallizáció MnAl₆ kiválások jelenlétével kapcsolódik össze [9].

A normális szemcsenövekedési folyamatot a kiválások jelenléte az egész mátrixban lehetetlenné teszi. Ugyanis csak néhány, az átlagostól eltérő szemcse képes kedvező energetikai helyzeténél fogva a növekedésre.

Az ilyen szemcsék lesznek a szekunder rekrisztallizáció nukleusai. Ezekre teljesül az alábbi energetikai feltétel [10]:

$$\Delta g_1 + \Delta g_i < \Delta g, \quad (14)$$

ahol Δg_1 a nukleus szabadenergia járuléka. A megfelelő értékek behelyettesítése után a (14) összefüggésből a növekedésre képes szemcse méretére a következő érték adódik:

$$D_1 > \frac{\bar{D}}{1 - \bar{D}/D_{\max}}. \quad (15)$$

Ezen összefüggés ismeretében a következő megállapításokat tehetjük a szekunder rekrisztallizáció létrejöttének feltételeire: a) csak az átlagostól nagyobb méretű

szemcsék lehetnek nukleusok, b) az átlagos szemcseméretnek kisebbnek kell lennie, mint a második fázisú részecskék hatása által megszabott maximális szemcseméret.

A fenti következtetések helyességét jól alátámasztják a MnS kiválásokat tartalmazó FeSi3% mintán végzett kísérletsorozat eredményei. 850 °C alatti hőkezelés során a szemcsék növekedése egy maximális méret elérése után leáll, ekkor az átlagos szemcseméret megegyezik a kiválások jelenléte által megszabott maximális szemcsemérettel (4. ábra). Tovább hőkezelve a mintát, 850° és 950 °C között a MnS részecskék eldurvulnak és részben feloldódnak, így a (10) összefüggésnek megfelelően a maximális szemcseméret értéke növekszik, nagyobb lesz mint az átlagos szemcseméret, aminek következtében egyes szemcsék már az átlagos méretnél nagyobbra nőhetnek, és így durva, szekunder szerkezet alakul ki. 950° fölé fűtve a mintát a MnS részecskék durvulása és feloldódása sokkal gyorsabban és nagyobb mértékben megy végbe, a maximális szemcseméret tovább növekszik, így egyre több szemcse teljesíti a szekunder rekrisztallizáció nukleusaira vonatkozó méretfeltételt. Az ekkor létrejövő szekunder szerkezet már sokkal kevésbé lesz durva, mint a 850 °C—950 °C között kialakult szerkezet [8].

Ez a kísérlet azt is mutatja, hogy a második fázisú részecskék okozta szekunder rekrisztallizáció főleg olyan hőmérséklettartományban válik jelentőssé, ahol ezek a részecskék méret és térfogati hányad tekintetében instabilak.

3.2. Oldott atomok hatása

Korábban azt tartották, hogy a fémekben az idegen elemek atomjainak jelenléte akadályozza ugyan a szemcsenövekedést, de ez a hatás nem elegendően nagy ahhoz, hogy szekunder rekrisztallizációt idézzon elő. Kísérleti eredmények alapján ma már egyre többen állítják, hogy az oldott atomok jelenléte is okozhat szekunder rekrisztallizációt.

Fiedler [11] kis mennyiségű bór, nitrogén és kén hatását vizsgálta FeSi3% ötvözetben. Különböző arányban adalékanyagokat adva az ötvözethez, minden esetben nyomonkövette a szemcsenövekedést. Eredményeit az 5. ábra mutatja. Látható, hogy a szekunder rekrisztallizáció létrejötte erősen függ attól, hogy a minta milyen mennyiségben és arányban tartalmaz adalékanyagokat. A három elem bármelyikének a hiánya esetén a szekunder folyamat elmarad.

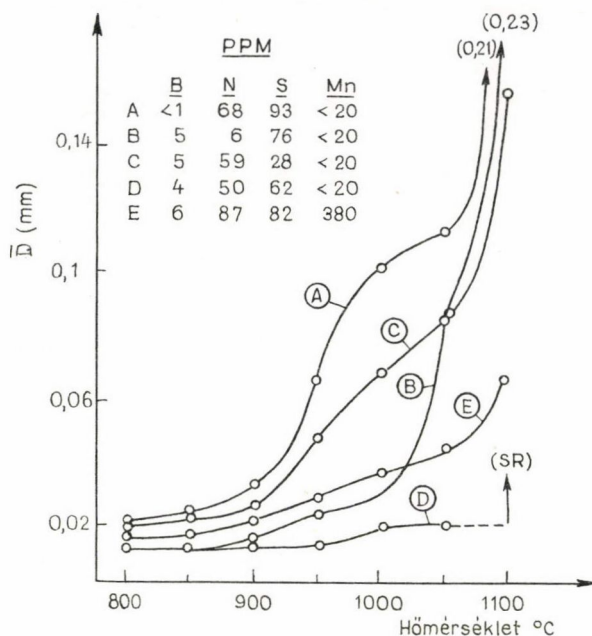
Hornbogen [12] vizsgálata során arra az eredményre jutott, hogy a szemcsehatárok mentén lévő nem egyensúlyi szegregációk szubmikroszkopikus második fázisú részecskéket alkotnak, melyek erős fékező hatást fejtenek ki a szemcsehatár mozgásra kis térfogati hányad esetén. A maximális szemcseméretet a következő összefüggéssel adta meg:

$$D_{\max} = d_i \sqrt{\frac{\eta'}{f}}, \quad (16)$$

ahol d_i a szemcsehatárnál levő, nem egyensúlyi szegregációból adódó szubmikroszkopikus részecskék mérete, és f a térfogati hányad.

Ha a szubmikroszkopikus részecskék mérete $d_i \approx 10^{-7}$ m és a térfogati hányad 0,01%, akkor a maximális szemcseméret $10 - 20 \cdot 10^{-6}$ m. Egyenletes eloszlásban levő második fázisú részecskék esetén ugyanakkora maximális szemcseméret eléréséhez 1% térfogati hányad szükséges.

Hornbogen kimutatta továbbá azt is, hogy a szemcsehatármenti szegregációval keletkezett részecskék szemcsehatármenti diffúzióval növekednek. Fiedlerhez hasonlóan ő is azt találta, hogy FeSi3% ötvözethez kis mennyiségben adott B, S, N elemek csak speciális esetben stabilizálják a szemcseszerkezetet.



5. ábra. Szemcseméret a hőmérséklet függvényében különböző mennyiségű adalékokat tartalmazó FeSi3%-ban 1 órás hőkezelés után

3.3. A textúra hatása

A szemcsenövekedést az egyes szemcsék közötti orientációviszonyok is befolyásolják. Kitüntetett kristályorientációk a szemcsedurvulást gátolhatják, ezért szekunder rekristallizáció jöhet létre.

Ennek a problémának a kísérleti vizsgálatával többek között Dunn és munkatársai foglalkoztak részletesebben [13]. Megfelelően orientált FeSi egykristályt hideghengerlés után alkalmasan megválasztott hőmérsékleten hőkezelték, amelynek során először primer rekristallizált szerkezet, majd magasabb hőmérsékletű hőkezelés után szekunder szerkezet jött létre. Transzmissziós Laue-felvételek segítségével meghatározták az egyes szemcsék orientációját mind a primer, mind pedig a szekunder rekristallizált szerkezetben. Az orientációviszonyok a két esetben különbözőnek adódtak. Eredményeik alapján a következőket állapították meg. Ha a primer szerkezetben a legtöbb szemcse egyazon kedvező orientációban van, néhány szemcse orientációja viszont ettől eltér, akkor ez utóbbiak szekunder szemcsékké nőhetnek, ha méretük nagyobb az átlagosnál. Ezek az átlagostól eltérő orientációjú, nagy szemcsék lesznek a szekunder rekristallizáció nukleusai.

A jelenség magyarázata abban van, hogy a közel azonosan orientált szemcsék között kisszögű szemcsehatár van, melyeknek a nagyfokú rendezettsége miatt mind az energiája, mind a mozgékonyasága kicsi, ennek következtében ezeknek a növekedése is lassan megy végbe.

A környezetétől eltérő orientációjú szemcsét azonban nagyszögű határok veszik körül, amelyeknek mind az energiája, mind pedig a mozgékonyasága nagyobb, mint a kisszögű határoké, így elsősorban ezek fognak mozogni. A szemcse méretétől függ, hogy a nagyszögű határok mozgása során növekszik, vagy összehúzódik.

A kritikus méretet a következő termodinamikai összefüggés határozza meg:

$$\frac{\Delta g_1}{V} = \eta_1 \frac{\gamma_B}{D_1} < \frac{\Delta g}{V} = \eta_1 \frac{\gamma_k}{\bar{D}}, \quad (17)$$

ahol Δg_1 az eltérő orientációjú szemcse szabadenergiája és Δg_k a kisszögű határok szabadenergiája. Innen

$$D_1 > \frac{\gamma_B}{\gamma_k} \bar{D}. \quad (18)$$

Látható, hogy a kritikus méret a szemcsehatárenergiák viszonyának függvénye. Általában $D_1 \approx 2\bar{D}$.

3.4. A mintavastagság hatása

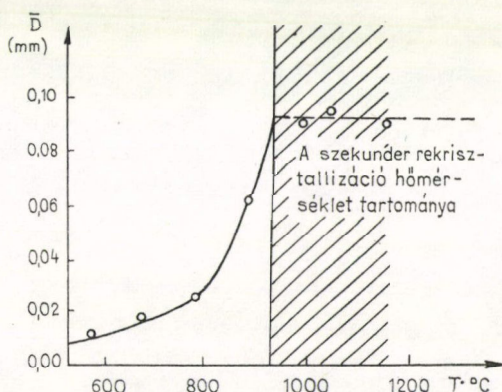
Már régóta ismert tény az, hogy a minta alakja is hatással van a szemcsedurvulásra. Huzal alakú mintákban a szemcsenövekedés leáll, ha a szemcsék mérete elérte a huzal átmérőjének nagyságát. Ekkor a huzalon keresztül haladó határok kiegyenesednek, egyensúlyi helyzet jön létre. Ugyanez figyelhető meg vékony, lemez alakú minták esetén is, ha a szemcseátmérő megközelítően kétszerese a mintavastagságnak (6. ábra). A végső szemcseméret általában arányos a mintavastagsággal [14].

Ezt a jelenséget a termikus barázdák hatásával magyarázhatjuk [15]. Hevítéskor a szemcsehatárban levő részecskék párolgásának és diffúziójának eredményeképpen a fém felületén árok keletkezik, amely erősen akadályozza a szemcsehatár mozgását. Tekintsük ezt a barázdát egy merev V alakú bevágásnak, amely a hozzá tartozó határ mozgása esetén is változatlan marad. Egyensúlyi helyzetben a megfelelő felületi, illetve határfeszültségeknek egyensúlyt kell tartaniuk (7. ábra). Az egyensúly feltétele:

$$\frac{T_{AB}}{\sin \gamma} = \frac{T_A}{\sin \beta} = \frac{T_B}{\sin \alpha}, \quad (19)$$

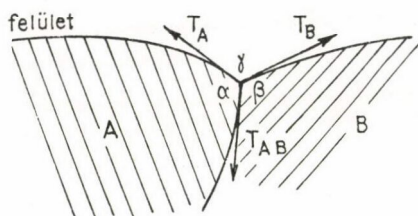
ahol α, β, γ a feszültségvektorok által bezárt szögek.

A barázda akkor rögzíti a mozgó határt, ha az a, b egyenesek kö-

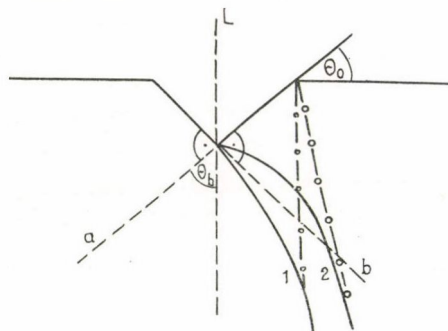


6. ábra. Szemcsenövekedés 0,04 mm vastag FeSi3% mintában. A végső szemcseméret $\sim 0,09$ mm

zött van (8. ábra), vagyis az L felületi normálissal bezárt Θ szöge kisebb mint Θ_0 , mivel ekkor a határnak meg kell nyúlnia a leszakadáshoz, ami energianövekedést igényel. Ebben az esetben beáll a (19) kifejezésnek megfelelő egyensúly.



7. ábra. Felületi feszültségvektorok egyensúlya termikus barázdánál



8. ábra. A termikus árok hatása a szemcsehatár mozgására. Az 1. határ rögzül, a 2. határ leszakad

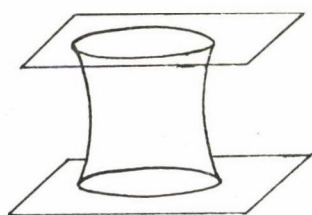
Ha azonban a határ az a, b sávon kívül esik, azaz L -vel bezárt szöge nagyobb, mint Θ_0 , akkor spontán leszakadhat, hiszen ebben az esetben nincs szükség a határ megnyúlására.

A termikus árok tehát akadályozza a határ szabad mozgását, de csak a minta felületén. A minta belsejében a határ tovább mozoghat. Az akadályozó hatást az árok nyílásszöge határozza meg.

Ha a szemcse már átéri a teljes mintavastagságot, akkor a határ a minta alsó, illetve felső felületén is rögzül, amennyiben $\Theta < \Theta_0$, és belül addig mozog, amíg a minimális felületű, egyensúlyi katenoid alakot el nem éri (9. ábra).

A fékező erő most a következő alakban fejezhető ki:

$$p = \frac{\gamma_B^2}{w\gamma_s}, \quad (20)$$



9. ábra. A katenoid felület sematikus ábrája

ahol γ_s a felületi energia és w a mintavastagság. A szemcsenövekedés leáll, ha a hajtó- és fékező erők egyenlővé válnak, tehát (2) és (20) felhasználásával:

$$\eta_1 \frac{\gamma_B}{D} = \frac{\gamma_B^2}{w\gamma_s}. \quad (21)$$

Ebből a maximális szemcseméretre a következőt kapjuk:

$$D_{\max} = \eta_1 \frac{\gamma_s}{\gamma_B} w. \quad (22)$$

Látható, hogy D_{\max} arányos a mintavastagsággal. A megfelelő felületi energia-értékek behelyettesítése után D_{\max} értéke kb. $2w$ -nek adódik.

A minta vékonysága tehát akadályozza a normális szemcsenövekedést, így szekunder rekrisztallizációt okozhat, amennyiben van olyan szemcse, amelynek felületi energiája kisebb, mint a környező szemcséké. Ez a különbség abból adódhat, hogy az egyes szemcsék felülethez képesti orientációja különböző, más-más kristálytani síkjaik párhuzamosak a felülettel. Ezek a kisebb felületi energiájú szemcsék lesznek a szekunder rekrisztallizáció nukleusai, és növekedésük szabadenergiáját a következő kifejezéssel adhatjuk meg [8]:

$$\frac{\Delta g_1}{V} = \eta_1 \frac{\gamma_B}{2} + \frac{2\Delta\gamma_s}{w} - \eta_1 \frac{\gamma_B}{D}, \quad (23)$$

ahol $\Delta\gamma_s$ a szemcsék közötti felületi energiakülönbség. A szemcse növekszik, ha mérete:

$$D \geq \frac{2\gamma_B w}{\gamma_B + 4\Delta\gamma_s}, \quad (24)$$

ami azt jelenti, hogy a növekedésre képes szekunder szemcse ebben az esetben kisebb mint az átlagos szemcseméret, ami körülbelül $2w$ nagyságú.

A 6. ábra egy 0,04 mm vastagságú FeSi3% mintában lejátszódó szekunder rekrisztallizációt mutat. Az átlagos szemcseátmérő a szekunder rekrisztallizáció előtt 0,09 mm volt. A különböző felületi energia-mérések azt mutatták, hogy csak akkor ment végbe a szekunder folyamat, ha teljesült az alábbi feltétel:

$$\Delta\gamma_s \geq 0,1 \gamma_s. \quad (25)$$

Ez azt jelenti, hogy a szekunder szemcséknek nagyobbak kellett lenniük, mint $0,9w$ [8].

4. TERCIER REKRISZTALLIZÁCIÓ

A krisztallitok felületi energiája nemcsak a kristálysíkjaik felülethez képesti orientációjától függ, hanem az adszorpciótól is, amit a hőkezelés atmoszférája és hőmérséklete határoz meg. A hőkezelési atmoszféra változtatásával megváltoznak az egyes szemcsék közötti felületi energiaviszonyok, ami szintén szekunder rekrisztallizációt idézhet elő.

A hőkezelési atmoszféra megváltoztatása a már létrejött szekunder szerkezetben is átalakulást okozhat. Pl diszpergált fázisként MnS zárványokat tartalmazó hengerelt Fe-Si ötvözetben a második fázisú részecskék hatására speciális szekunder szerkezet, ún. Goss-textúra alakult ki (110) [001] orientációval [8]. Az ötvözetet oxigénnyomokat tartalmazó atmoszférában hőkezelve a Goss-textúrától eltérő köbös szerkezet (001) [100] jött létre. Az új atmoszférában a felületi energiaviszonyok megváltozása miatt más szemcsék kerültek kedvező állapotba, és ezek növekedtek. Ez a folyamat a tercier rekrisztallizáció, melynek során a szekunder szerkezettől eltérő tercier rekrisztallizált szerkezet alakul ki. Ezután az előzetesen oxigén atmoszférában hőkezelt mintát újra száraz hidrogén atmoszférába, vagy magas vákuumba helyezve a köbös textúra eltűnt és újra a Gosste-textúra jött létre.

5. A SZEKUNDER REKRISZTALLIZÁCIÓ GYAKORLATI ALKALMAZÁSA

A szekunder rekrisztallizáció eredményeképpen létrejövő durva szemcsés szerkezetű fémek, ötvözetek mechanikai tulajdonságai kedvezőtlenek, mivel a szilárdság, alakíthatóság a szemcseméret növekedésével erősen csökken. Ezért a fémek, illetve az ötvözetek mechanikai felhasználása, megmunkálása során a hőkezelés feltételeit lehetőleg úgy kell megválasztani, hogy a szekunder rekrisztallizáció elkerülhető legyen.

A mágneses tulajdonságok szempontjából egészen más a helyzet. Pl. mágneses vasminták esetén gyakran alkalmaznak olyan eljárást, amely szekunder rekrisztallizáción keresztül durva szemcsés szerkezetre vezet, mivel ezzel javítják a mágneses tulajdonságokat. Ugyanis a szemcseméret növekedésével a doménméret is nő a következő összefüggés szerint [16]:

$$d_d \sim \sqrt{D}, \quad (26)$$

ahol d_d a doménméret.

Néhány esetben a szekunder rekrisztallizáció során olyan kedvező kristályorientáció jön létre, amely mágneses anizotrópiát okoz. Pl. a MnS-t tartalmazó Fe-Si ötvözetben kialakuló Goss-textúra (110) [001] azért fontos, mert a [001] irány a könnyű mágnesezhetőség iránya.

Előfordulhat az is, hogy a szekunder rekrisztallizáció okozta szemcseszerkezetváltozás lerontja a kedvező kristályorientációt. Ez történik pl. Fe-Ni 50% ötvözetben, ahol a primer rekrisztallizáció során alakul ki az ugyancsak kedvező köbös (100) [001] textúra 1100 °C fölötti hőkezeléskor, amely a szekunder rekrisztallizáció következtében megváltozik, így a jó mágneses tulajdonságok elromlanak [8].

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A fémekben akkor játszódik le szekunder rekrisztallizáció, ha valamilyen hatás gátolja a normális szemcsenövekedést. A folyamat során egyes kitüntetett szemcsék az akadályozó hatás ellenére is növekedni tudnak, és az átlagos méret sokszorosára nőnek, így inhomogén szerkezet alakul ki.

Ilyen szemcsenövekedést gátló hatás lép fel akkor, ha második fázisú részecskék vagy oldott atomok vannak jelen az anyagban, ha a szemcsék jelentős része azonos orientációjú, de vannak ettől eltérő orientációjú szemcsék is, ha a minta vastagsága összemérhető a szemcsék méretével, vagy ha változik a hőkezelés atmoszférája.

A kiválások és idegen atomok akadályozzák a szemcsehatár szabad mozgását, ezzel akadályozzák a szemcsenövekedést. Erősen textúrált anyag esetén a nagy-, illetve a kisszögű határok energiája és mozgékonyasága közti különbség okoz differenciált szemcsenövekedést. Vékony mintában a felületi hatások válnak jelentőssé, a hőkezelés során a felületen keletkezett barázdák fékezik a szemcsehatárok mozgását. A hőkezelési atmoszféra változtatásakor a felületi adszorpció következtében változnak meg a felületi energiaviszonyok úgy, hogy csak egyes szemcsék tudnak növekedni.

IRODALOM

1. *M. Avrami*, J. Chem. Phys. 9, 174, 1941.
2. *P. A. Beck, J. C. Kremer and M. L. Holzworth*, Trans. HME, 175, 372, 1948.
3. *P. Feltham*, Acta Met. 5, 97, 1957.
4. *M. Hillert*, Acta Met. 13, 227, 1965.
5. *V. Y. V. Novikov*, Acta Met. 26, 1939, 1978.
6. *G. T. Higgins*, Metal Science, 8, 143, 1974.
7. *F. Haessner and S. Hofmann*, Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner), Dr. Rieder-Verlag GMBH, Stuttgart, 1978. p. 63.
8. *K. Detert*, Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner), Riederer-Verlag, Stuttgart, 1978. p. 97.
9. *P. A. Beck, M. L. Holzworth and P. R. Sperry*, Trans. AIME, 180, 163, 1949.
10. *J. E. Burke and D. Turnbull*, Progress in Metal Physics, ed. B. Chalmers, Vol. 3. Pergamon Press, London, 1952. p. 220.
11. *H. C. Fiedler*, Met. Trans. 8A, 1307, 1977.
12. *E. Hornbogen*, Metall, 29, 247, 1975.
13. *C. G. Dunn*, Acta Met. 1, 163, 1953.
14. *P. A. Beck, J. C. Kremer, J. L. Demer and M. L. Holzworth*, Trans. AIME. 175, 372, 1948.
15. *W. Mullins*, Acta Met. 6, 414, 1958.
16. *S. Chikasumi*, Physics of Magnetism, John Wiley and Sons, Suc., New York, London, Sydney 1964. p. 233.

13. DINAMIKUS MEGÚJULÁS ÉS ÚJRAKRISTÁLYOSODÁS

TASNÁDI PÉTER

ELTE Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	575
2. A dinamikus megújulás és újrakristályosodás jellemző tulajdonságai	577
2.1. Dinamikus megújulás	577
2.2. Dinamikus újrakristályosodás	578
2.3. A dinamikus megújulás és újrakristályosodás összehasonlítása	578
3. A dinamikus megújulás és újrakristályosodás elméleti értelmezése	580
3.1. Megújulási modellek	581
3.2. Újrakristályosodási elméletek	584
3.2.1. A feszültség-megújulás összefüggés értelmezése	584
3.2.2. A csíráképződés leírása	588
3.2.3. Újrakristályosodási kinetikák	590
Irodalom	590

1. BEVEZETÉS

A kísérleti tapasztalatok szerint a fémek alakításuk során keményednek, míg hőkezeléskor lágyulnak. A keményedés mikroszerkezetiileg a diszlokációsűrűség növekedésével, a lágyulás pedig a diszlokációk eltűnésével, kötegekbe rendeződésével magyarázható. A deformáció során bekövetkező folyáshatár-növekedést alakítási keményedésnek nevezzük. A hőkezeléskor bekövetkező lágyulás két jól megkülönböztethető folyamattal mehet végbe:

a) Megújulásról (recovery) beszélünk akkor, ha a hőkezelés során csak diszlokációmozgás, ill. megsemmisülés következik be, az anyag szemcseszerkezete azonban változatlan marad.

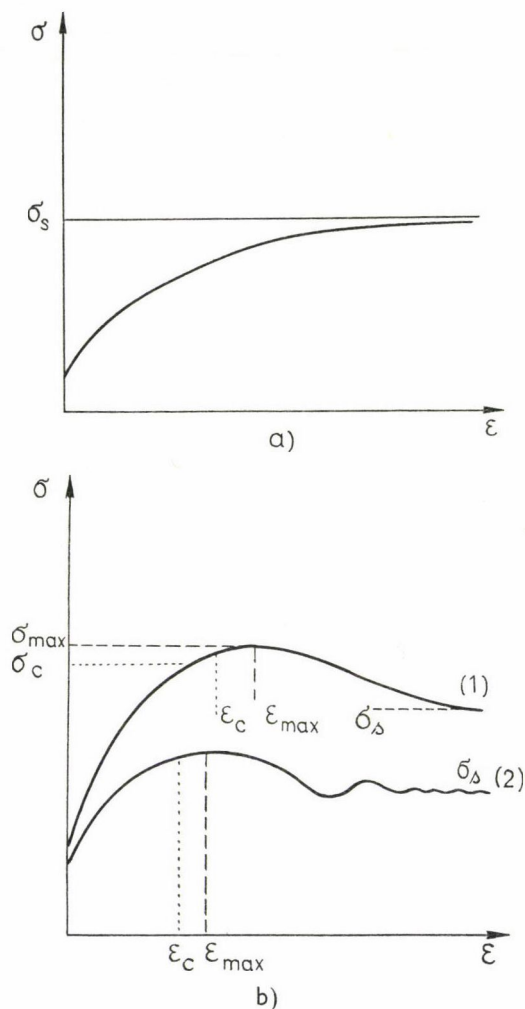
b) A hőkezelés során megváltozhat az anyag szemcseszerkezete is. Ezt a folyamatot újrakristályosodásnak nevezzük. A lágyulási folyamatok általában csak magas $T > 0,5 T_m$ hőmérsékleten zajlanak le, így a hidegalakítás és a hőkezelés folyamata egymástól függetlenül tárgyalható.

Melegalakítás során azonban a deformáció miatt bekövetkező diszlokációsokszorozódás mellett jelentős szerepet játszik a termikusan aktivált diszlokációmozgás is. Ily módon a keményedési és lágyulási folyamatok egyidejűleg is végbe-mehetnek.

A melegalakítással egyidejűleg lezajló megújulást *dinamikus megújulásnak*, az újrakristályosodást pedig *dinamikus újrakristályosodásnak* nevezzük. Az utóbbi folyamat létezése sokáig vitatott volt [1], a hetvenes évek közepére azonban egyértelműen

elfogadottá vált az irodalomban [2]. Jelen cikkben a keményedést kompenzáló dinamikus megújulási és újrakristályosodási folyamatokkal foglalkozunk.

E folyamatok létezésének legjobb kísérleti bizonyítékait a melegalakítás során felvett feszültség-megnyúlás görbék szolgáltatják. Az 1a. ábrán dinamikus megújulás, az 1b. ábrán dinamikus újrakristályosodás során felvett függvény sematikus képe látható. A dinamikus megújuláskor felvett függvényre jellemző, hogy monoton növekedéssel stacionárius értéket ér el. A keményedési és lágyulási folyamatok tehát fokozatosan egyensúlyba kerülnek.



1. ábra. a) Dinamikus megújulás során felvett $\sigma(\epsilon)$ grafikon sémája; b) Dinamikus újrakristályosodás $\sigma(\epsilon)$ görbéinek sémája: 1. Z nagy értéke mellett, 2. Z kicsiny értéke mellett

Az 1b. ábrán látható görbék különböző körülmények között lejátszódó újrakristályosodási folyamatokhoz tartoznak. A feszültség mindkét esetben állandó értékhez tart, a keményedési és lágyulási folyamatok tehát ebben az esetben is egyensúlyba kerülnek. A stacionárius érték azonban az egyik esetben erős feszültségmaximum után következik be, a másik esetben pedig oszcillálva áll be. (A jelenség magyarázatára a későbbiekben még visszatérünk.)

Mindkét folyamat — amint ezt látni fogjuk — igen sok tényező függvénye. A hőmérséklet mellett fontos szerepet játszik az alakítás sebessége és a kezdeti mikro-szerkezet is. A következőkben áttekintjük a dinamikus megújulás és újrakristályosodás jellegzetes tulajdonságait. Röviden foglalkozunk a folyamatok elméleti értelmezésének lehetőségeivel is, előrebocsátjuk azonban, hogy a problémakör igen bonyolult s elméletileg még tisztázatlan.

2. A DINAMIKUS MEGÚJULÁS ÉS ÚJRAKRISTÁLYOSODÁS JELLEMZŐ TULAJDONSÁGAI

Ebben a fejezetben, elsősorban az [1—6] összefoglaló munkák alapján áttekintjük és összehasonlítjuk a dinamikus megújulási és újrakristályosodási folyamatok jellemző tulajdonságait.

2.1. Dinamikus megújulás

A kísérleti tapasztalatok szerint a dinamikus megújulás elsősorban a magas rétegződési hiba energiával rendelkező anyagokban megy végbe. Ezekben az anyagokban a termikusan aktivált diszlokációmozgás viszonylag könnyen végbemehet, mert a diszlokációk a nagy rétegződési hiba energia miatt nem szakadnak parciálisokra, s így nem válnak rögzítetté. Jellegzetesen dinamikus megújulást mutató anyag pl. az alumínium és az α vas [7—9].

Dinamikus megújulás a $0,5 T_m < T < 0,9 T_m$ hőmérséklettartományban végzett alakítás során játszódhat le. Aktiválási energiája megegyezik az öndiffúzió s így a diszlokációkúszás aktiválási energiájával.

A folyamat mind állandó alakítási sebesség ($\dot{\epsilon}$), mind állandó feszültség (σ) mellett lejátszódhat. A lehetséges alakítási sebességtartomány igen széles: $10^{-6} < \dot{\epsilon} <$

$< 10^3$. Az m sebességérzékenységi paraméter, amelynek definíciója $m = \frac{d \ln \sigma}{d \ln \dot{\epsilon}}$ általában a $0,15 < m < 0,25$ tartományba esik. A deformáció során a diszlokáció keletkezési és eltűnési folyamatok egyensúlyba kerülnek és állandó diszlokációs-sűrűség alakul ki. Az alakítás stacionárius szakaszában az eredeti szemcsék enyhén megnyúlnak, ugyanakkor egyenlő méretű, azonos orientációjú és azonos tengelyű szubszemcsék alakulnak ki. A szubszemcsék határai dinamikus egyensúlyba kerülnek, a deformáció során felbomlanak és újraalakulnak. A hőmérséklet növelésével, ill. a deformációsebesség csökkentésével a szubszemcsék nagyobb, határaik pedig tökéletesebbé válnak. A σ_s stacionárius feszültség és a d szubszemcseméret között a

$$\sigma_s = \sigma_1 + k_1 d^{-1} \quad (1)$$

összefüggés áll fenn, ahol σ_1 és k_1 anyagi állandók.

A deformáció elsősorban diszlokációmozgással (csúszás, keresztcsúszás, kúszás) megy végbe, a szemcsehatárcsúszás járuléka elhanyagolható. A diszlokációs szerkezet újjászerveződése diszlokációkötegek és kisenergiájú diszlokációhálók kialakulásában nyilvánul meg.

A dinamikus megújulással igen finom mikroszerkezet alakítható ki, s ez igen kedvező mechanikai tulajdonságokkal rendelkező végterméket eredményezhet. Az így kialakított anyagok termikusan stabilisak és kúszásállóságuk is nagy, mert a sztatikus újrakristályosodás lassú és könnyen gátolható. A kúszásállóság különösen akkor jó, ha a finomszemcsés szerkezetet kiválások is stabilizálják [10]. A szoba-hőmérsékleti szakítószilárdság és a szubszemcseméret között a

$$\sigma = \sigma_2 + k_2 d^{-1} \quad (2)$$

összefüggés áll fenn, ahol d a szubszemcsék átlagos mérete, σ_2 és k_2 pedig anyagi állandók [4].

2.2. Dinamikus újrakristályosodás

A dinamikus újrakristályosodás többnyire a kis rétegződési hiba energiával rendelkező anyagokban megy végbe. A kicsiny rétegződési hiba energia miatt ezekben az anyagokban a diszlokációk könnyen parciálisokra bomlanak s így rögzítetté válnak. Emiatt a diszlokációk újrarendeződése ezekben az anyagokban elsősorban szemcsehatármozgással valósul meg.

Jellegzetesen dinamikus újrakristályosodást mutató anyag a réz, a nikkel és a γ vas [13—15].

Dinamikus újrakristályosodás a $0,5 T_m < T < 0,9 T_m$ hőmérséklettartományban végzett alakítás során játszódhat le. Aktiválási energiája nagyobb az öndiffúzió és a szemcsehatár-mozgás aktiválási energiájánál is. Az aktiválás nem kapcsolható egyértelműen egy meghatározott atomi folyamathoz [4]. A folyamat mind állandó alakítási sebesség, mind állandó feszültség mellett végbemehet. Jellemző azonban, hogy az újrakristályosodási folyamat csak egy kritikus ε_0 deformáció elérése után indul meg [14]. Az újrakristályosodás során kevert méretű szemcseszerkezet keletkezik, amelyben a nagy szemcsék megnyúltak. A diszlokációs szerkezet is egyenetlen, a nagy szemcsékben nagy diszlokációsűrűség alakul ki, míg a kis szemcsék szinte teljesen diszlokációmentesek. Az átlagos diszlokációsűrűség azonban állandó.

A stacionárius feszültség a

$$\sigma_s = \sigma_3 + k_3 d_g^{-1} \quad (3)$$

összefüggés szerint függ a szemcsemérettől, ahol σ_3 és k_3 anyagi állandók, d_g pedig a szemcseméret.

A dinamikus újrakristályosodó anyagok alakításakor a szemcsékben először nő a diszlokációsűrűség, majd a kritikus diszlokációsűrűség elérése után magképződés zajlik le, új, diszlokációmentes szemcsék keletkeznek. Ezekben a szemcsékben a diszlokációsűrűség újra elérheti a magképződéshez szükséges kritikus értéket, s így az újrakristályosodás ismétlődhet. Ez a több hullámban végbemenő folyamat okozza a $\sigma(\varepsilon)$ görbéken látható jellegzetes oszcillációkat (1b. ábra). Megjegyezzük még, hogy az újrakristályosodott szemcsékben többnyire dinamikus megújulás is történik.

A dinamikus újrakristályosodás során fellépő maximális feszültség (1. ábra) széles feszültségtartományban lineáris függvénye a

$$Z = \dot{\epsilon} e^{\frac{Q}{RT}} \quad (4)$$

Zener—Holoman-paraméternek [14].

A dinamikus újrakristályosodott anyagok igen finom szemcseszerkezettel rendelkeznek, ezért szobahőmérsékleti szakítószilárdságuk magas. A szakítószilárdság a szemcsemérettől a

$$\sigma = \sigma_4 + k_4 d_g^{-1/2} \quad (5)$$

Hall—Petch-egyenlet [11, 12] szerint függ, ahol d_g az átlagos szemcseméret, σ_4 és k_4 anyagi állandók. A szerkezet azonban nem stabilis, az anyag könnyen újrakristályosodik és kúszásállósága is gyenge.

2.3. A dinamikus megújulás és újrakristályosodás összehasonlítása

A következőkben McQueen és Baudalet nyomán összefoglaljuk a kétféle folyamattal kapcsolatos legjellemzőbb sajátságokat [4].

Megújulásra hajlamos anyag tulajdonságai

Újrakristályosodásra hajlamos anyag tulajdonságai

Kiinduló szerkezet

Egyfázisú, nagy rétegződési hiba energiájú anyag

Egyfázisú, kis rétegződési hiba energiájú anyag

Stacioner szerkezet $\dot{\epsilon}$, T , σ állandó esetén

Egységes méretű, azonos tengelyű szub-szerkezet, q =állandó, a diszlokáció-eloszlás egyenletes

Kevert méretű szemcsék, a diszlokáció-eloszlás nem egyenletes, de q =állandó

$A \ 0,5 T_m < T < 0,9 T_m$ hőmérséklet intervallumban lehetséges deformáció sebességek:

$$10^{-6} < \dot{\epsilon} < 10^3$$

$\dot{\epsilon}$ korlátozott. Csak olyan értékek lehetségesek, amelyek túl kicsik, vagy túl nagyok ahhoz, hogy csak megújulás jöjjön létre.

Mechanikai tulajdonságok finomszemcsés szerkezet esetén:

$$\sigma = \sigma_2 + k_2 d^{-1}$$

$$\sigma = \sigma_4 + k_4 d_g^{-1/2} \quad (6)$$

Jó kúszásállóság és termikus stabilitás a jellemző

Gyenge kúszásállóság és termikus stabilitás a jellemző.

Végül megjegyezzük, hogy ötvöztetés hatására olyan anyagokban is végbemehet dinamikus újrakristályosodás, amelyek szerkezete tiszta formában kizárólag dinamikus megújulással változott. Gardner és Grimes Al-Mg és Al-Zn ötvözeteket vizsgálva megállapították, hogy 5%, ill. annál nagyobb ötvöző adalékolás hatására az ötvöztet rétegződési energiája olymértékben csökkent, hogy a $0,9 T_m$ hőmérsékleten történő összenyomáskor dinamikus újrakristályosodás következett be [7].

3. A DINAMIKUS MEGÚJULÁS ÉS ÚJRAKRISTÁLYOSODÁS ELMÉLETI ÉRTELMEZÉSE

A dinamikus megújulásra és újrakristályosodásra vonatkozó elméletek általában az alakváltozás stacionárius szakaszát értelmezik. *Mecking és Lücke* [16–17] általános elmélete szerint a keményedési és lágyulási folyamatok szuperpozíciójának eredményeként a $d\varepsilon$ elemi megnyúlás a

$$d\varepsilon = d\varepsilon_k + d\varepsilon_l \quad (7)$$

alakban írható fel, ahol $d\varepsilon_k$ a keményedés, $d\varepsilon_l$ pedig a lágyulás során bekövetkező elemi megnyúlás. A feszültség $d\sigma$ elemi növekménye viszont

$$d\sigma = d\sigma_k - d\sigma_l \quad (8)$$

alakú, mert a lágyulás miatt az anyag szilárdsága csökken.

A (7) és (8) egyenleteket idő szerint deriválva és feltételezve a $\sigma = \sigma(\varepsilon(t))$, valamint $\sigma_k = \sigma_k(\varepsilon_k(t))$ közvetett függvénykapcsolatokat, (7) felhasználásával (8) a

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} \dot{\varepsilon} = \frac{d\sigma_k}{d\varepsilon_k} \dot{\varepsilon}_k - \dot{\sigma}_l = \frac{d\sigma_k}{d\varepsilon_k} \dot{\varepsilon} - \frac{d\sigma_k}{d\varepsilon_k} \dot{\varepsilon}_l - \dot{\sigma}_l \quad (9)$$

alakra hozható. Ez az összefüggés a

$$\Theta = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \quad \text{és} \quad h = \frac{d\sigma_k}{d\varepsilon_k}$$

jelölések bevezetésével és további átrendezéssel a

$$h\dot{\varepsilon} + \dot{\sigma}_l = (h - \Theta)\dot{\varepsilon} \quad (10)$$

alakban is felírható. Stacionárius folyamatban $\dot{\varepsilon}$ mellett Θ és h is állandónak tekinthető, így

$$h\dot{\varepsilon}_l + \dot{\sigma}_l = r = \text{állandó}$$

ahol r a megújulási együttható. Ennek felhasználásával (10) a

$$\Theta = h - \frac{r}{\dot{\varepsilon}} \quad (11)$$

alakot ölti. Ez az egyenlet stacionárius kúszás ($\Theta = 0$) esetén a Bailey—Orowán-féle

$$h = \frac{r}{\dot{\varepsilon}} \quad (12)$$

alakra egyszerűsödik.

A megújulás és újrakristályosodás értelmezésére szolgáló modellek alapjául általában a fenti fenomenologikus egyenlet valamely a mikroszerkezetre, általában a diszlokációsűrűségre és a diszlokációsűrűség változására vonatkozó feltevésekkel kiegészített változata szolgál. A modellek a folyásfeszültség és diszlokációsűrűség kapcsolatát általában a

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{\bar{\rho}} \quad (13)$$

egyenlettel veszik figyelembe [18, 19].

Mivel a diszlokációsűrűség és folyásfeszültség között egyértelmű kapcsolat van, a megújulási folyamatok stacionárius szakaszában az átlagos diszlokációsűrűség állandó kell legyen (ez megegyezik a kísérleti tapasztalatokkal), vagyis a keményedési folyamat diszlokációsokszorozó és a lágyulási folyamat diszlokációsűrűség-csökkenő hatásának meg kell egyeznie.

3.1. Megújulási modellek

A fentiek alapján egyszerű differenciális modell konstruálható a dinamikus megújulás leírására.

Az alakítási keményedés során bekövetkező diszlokációsűrűség-növekedés sebessége a

$$d\varepsilon = b l d\rho \quad (14)$$

egyenletből a

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_k = \frac{1}{bl} \frac{d\varepsilon}{dt} \quad (15)$$

összefüggéssel adható meg, ahol ρ a diszlokációsűrűség, b a Burgers-vektor, l pedig a diszlokációk átlagos szabad úthossza. A megújulás során bekövetkező diszlokációsűrűség-változás sebessége pedig a Friedel-féle

$$\frac{dR}{dt} = M \frac{\sigma}{R} \quad (16)$$

egyenletből határozható meg, ahol R a diszlokációháló átlagos mérete, M a megújulási mozgékonyság [19]. Mivel általában

$$R \sim \rho^{-1/2} \quad (17)$$

így

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_r = -2M\sigma\rho^2 \quad (18)$$

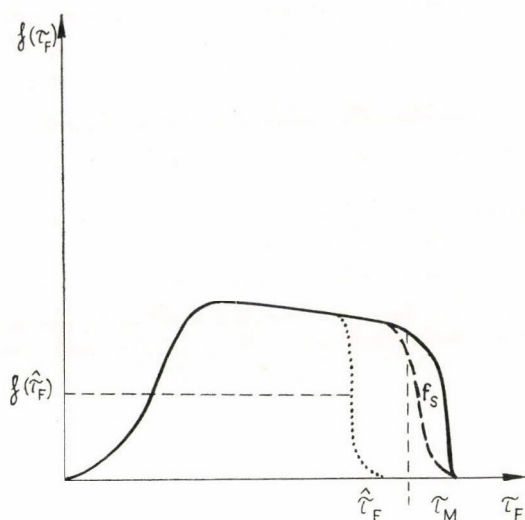
Az alakváltozás stacionárius szakaszában a diszlokációsűrűség állandó, tehát

$$\left(\frac{d\rho}{dt}\right)_k + \left(\frac{d\rho}{dt}\right)_r = 0,$$

azaz

$$\frac{\dot{\varepsilon}}{bl} = 2M\sigma\rho^2. \quad (19)$$

A kapott összefüggésekben nem tükröződik az alakváltozás dinamikus jellege, ezért *Kocks és Mecking* módosította a modellt [21]. A megújulás folyamatát szakaszos (jerky) diszlokációmozgással veszik figyelembe. Feltételezésük szerint a megújulás során a diszlokációk metastabil egyensúlyi helyzetek sorozatán keresztül lökés-szerűen mozognak. Az egyes diszlokációs szakaszok lokálisan különböző nagyságú τ_F feszültségek hatására aktiválódnak. A szükséges aktivációs feszültségek $f(\tau_F)$



2. ábra. Diszlokációeloszlás τ_F húzófeszültség mellett

szint közelében található diszlokációs szakaszok aktiválódnak leggyorsabban, s ennek megfelelően az eloszlásfüggvény egy idő múlva már a $\hat{\tau}_F < \tau_M$ érték előtt levág (2. ábra). A $\hat{\tau}_F$ érték a (7) egyenlet integrálása után az $f(\tau_F)$ függvény inflexió pontjának meghatározásával adható meg.

Eredményül a

$$\dot{\hat{\tau}}_F \sim -v_0 e^{-\frac{\Delta G\left(\frac{\tau_F}{\tau_M}\right)}{kT}} \quad (21)$$

összefüggés adódik.

A $\hat{\tau}_F$ érték és a τ folyásfeszültség közötti kapcsolat a

$$\bar{Q} = \int_0^{\hat{\tau}_F} l f(\tau_F) d\tau_F = l \bar{f}(\hat{\tau}_F) \hat{\tau}_F \quad (22)$$

átlagos diszlokációs sűrűség meghatározása után a (13) összefüggéssel adható meg. Ily módon a diszlokációs sűrűség időbeli változása a

$$\left(\frac{dQ}{dt}\right)_r = l f(\hat{\tau}_F) \dot{\hat{\tau}}_F = Q \frac{\dot{\hat{\tau}}_F}{\tau_F} \frac{f(\hat{\tau}_F)}{f(\tau_F)} \quad (23)$$

alakot ölti, amiből

$$\frac{\dot{\tau}}{\tau} = \frac{\dot{Q}}{2Q} \sim \frac{\dot{\hat{\tau}}_F}{\tau_F} \sim -v_0 e^{-\frac{\Delta G\left(\frac{\tau}{\tau_M}\right)}{kT}} \quad (24)$$

A megújulás során megsemmisülő diszlokáció szakaszok a megújulást megelőző nyúlás során halmozódtak fel. Ha nincs megújulás, akkor a de megnyúlás hatására

térfogati eloszlással vehető figyelembe. Az f függvény a τ_F feszültséggel aktiválható diszlokációs szakaszok számát jelenti térfogategységként. Az $f(\tau_F)$ függvény sematikus képét a 2. ábra mutatja. A függvény legjellegzetesebb vonása az hogy egy τ_M felső korláttal rendelkezik.

Az $f(\tau_F)$ eloszlásfüggvény alakja a termikus aktiváció hatására a

$$\left(\frac{df}{dt}\right)_r = -f(\tau_F) v_0 e^{-\frac{\Delta G\left(\frac{\tau_F}{\tau_M}\right)}{kT}} \quad (20)$$

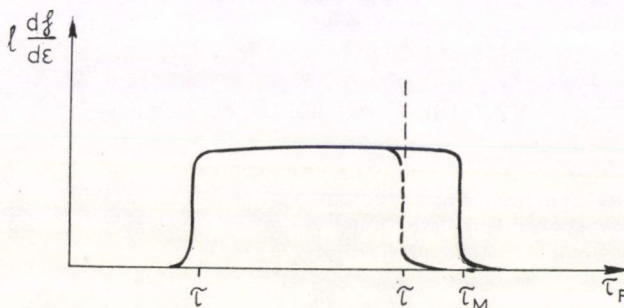
összefüggés szerint változik időben, ahol ΔG a szabad enthalpia változása, k a Boltzman-állandó, T az abszolút hőmérséklet, v_0 állandó. Ez azt fejezi ki, hogy a τ_M

bekövetkező diszlokációsűrűség változást a

$$\left(\frac{d\rho}{d\varepsilon}\right)_h = \int_{\tau}^{\tau_M} l \frac{df}{d\varepsilon} d\tau_F = \varphi(\tau, \tau_M)(\tau_M - \tau) \quad (25)$$

kifejezés adja. Az integrálás alsó határáként azért választottuk a τ folyásfeszültség értéket, mert olyan diszlokációs szakaszok nem mozognak, amelyek τ -nál kisebb feszültség hatása alatt állnak.

A φ függvény a $\tau < \tau_F < \tau_M$ intervallumban egy állandó értékkel közelíthető. Az $l \frac{d\rho}{d\varepsilon}$ eloszlás alakját kvalitatíve a 3. ábra mutatja. A termikus aktiválás miatt a relatíve nagy τ_F feszültség hatása alatt álló diszlokáció-szakaszok megsemmisülhetnek, ugyanakkor más diszlokáció szakaszok keletkezhetnek.



3. ábra

Egy meghatározott megújulási sebesség mellett a megújulási és felhalmozódási sebesség egyenlővé válhat. Az ehhez szükséges τ_F feszültséget τ_s -nek nevezzük. A τ_s -nél nagyobb τ feszültségek hatása alatt álló diszlokációk gyorsan mozgásba jönnek, ezért az eloszlás megváltozik. A $\tau_s < \tau < \tau_M$ tartományban tehát általában gyorsan kialakul az egyensúlyi f_s eloszlás a

$$\left(\frac{df}{d\varepsilon}\right)_h \dot{\varepsilon} = -\left(\frac{df}{dt}\right)_r = f_s(\tau_F) v_0 e^{-\frac{\Delta G\left(\frac{\tau_F}{\tau_M}\right)}{kT}} = f_s v_0 e^{-\frac{\Delta G\left(\frac{\tau_s}{\tau_M}\right)}{kT}} \quad (26)$$

egyenletnek megfelelően. Mivel az eloszlásfüggvény ebben az esetben τ_M helyett már a τ_s értéknél levág, ezért a (25) összefüggés a

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \varphi(\tau, \tau_s)(\tau_s - \tau) \quad (27)$$

a alakot ölti.

A feszültség megnyúlás görbe pontos alakja a $\varphi(\tau, \tau_s)$ függvénytől függ. A φ függvény jól közelíthető a

$$\varphi = \frac{\tau}{\tau_s} \quad (28)$$

összefüggéssel. Ekkor a (27) egyenlet a

$$\frac{d\tau}{d\varepsilon} = \left(1 - \frac{\tau}{\tau_s}\right) \quad (29)$$

Voce-féle törvénybe megy át, a τ_s telítési feszültség pedig az

$$\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} = \left(\frac{\tau_s}{\tau_M}\right)^n \quad (30)$$

összefüggéssel közelíthető, ha az

$$n \equiv -\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial(\Delta G)}{\partial \ln \tau_s} \right)_T \quad (31)$$

érték a kérdéses tartományban állandónak tekinthető. A fenti modell jól tükrözi azt a kísérleti tapasztalatot, hogy az alakítási keményedési sebesség csak csekély mértékben függ a feszültségtől és megnyúlástól.

3.2. Újrakristályosodási elméletek

Az újrakristályosodással foglalkozó elméleteknek nagyon szerteágazó és még viszonylag rendezetlen tapasztalati tényanyag magyarázatát kell megadni. Az elméleti munkák elsősorban a feszültség-megnyúlás ($\sigma(\varepsilon)$) összefüggés [22, 23], a rekrisztallizációs csíráképződés [24], valamint az újrakristályosodási kinetika értelmezésére koncentrálnak [15]. Emellett egyes szerzők foglalkoznak az újrakristályosodási folyamat szemcseméret függésével is [25].

3.2.1. A feszültség-megnyúlás összefüggés értelmezése

A feszültség-megnyúlás függvény meghatározása minden elméletben a (13) egyenleten alapul, vagyis az átlagos diszlokációsűrűség meghatározására vezethető vissza.

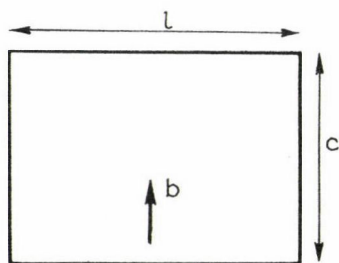
A diszlokációsűrűség meghatározásakor az alakítási keményedési és megújulási folyamatok mellett figyelembe kell venni azt is, hogy az újrakristályosodási front mögött a diszlokációsűrűség zérusra csökken.

Stüwe és Ortner azt tételezi fel, hogy az alakítási keményedés során téglalap alakú diszlokációhurok keletkeznek (4. ábra), [22]. Amennyiben egy hurok átlagosan V térfogatban keletkezik, akkor a diszlokációsűrűség növekedése

$$d\rho = \frac{2(l+c)}{V}$$

Az így létrejövő megnyúlás pedig

$$d\varepsilon = \frac{lcb}{V}$$



4. ábra. Téglalap alakú diszlokációhurok

ezért

$$\frac{d\varrho}{d\varepsilon} = \frac{2(l+c)}{lcb}$$

ami az $l \gg c$ esetben a

$$\frac{d\varrho}{d\varepsilon} = \frac{2}{bc}$$

alakra egyszerűsödik.

Az egyenlet csak a $c=c(\varepsilon)$ összefüggés ismeretében integrálható. A leg-egyszerűbb esetben a $c=\text{állandó}$ feltevéssel élve azt kapjuk, hogy

$$\varrho = \frac{2\varepsilon}{bc}$$

A (13) egyenletből az $\alpha=0,2$ érték, valamint a diszlokációs-sűrűség fenti kifejezése segítségével a

$$\frac{\sigma}{\mu} = \sqrt{0,08 \frac{b}{c} \varepsilon}$$

összefüggés adódik.

Amikor a diszlokációs-sűrűség egy ϱ_c kritikus értéket meghalad, új szemcsék képződnek és megindul az újrakristályosodás. Az új szemcsék határai átlagosan v sebességgel mozognak, és R távolság megtétele után találkoznak egy másik határral. Feltételezve, hogy az új szemcsék egyenletesen eloszolva és homogén méret-eloszlással jöttek létre, a határtalálkozás után az újrakristályosodás befejeződik.

A folyamat azonban megismétlődhet. Az újrakristályosodási front ugyan szinte „kisepri” a diszlokációkat az anyagból, az alakítási keményedés miatt azonban a diszlokációképződés tovább folyik, s a rekrisztallizációs front mögött a diszlokációs-sűrűség ismét elérheti a ϱ_c kritikus értéket. Ekkor ismét új szemcsék nukleálódnak, s újabb rekrisztallizációs ciklus veszi kezdetét.

Feltéve, hogy a $\dot{\varrho}$ diszlokációképződési és a v határsebesség állandó, akkor a kritikus sűrűség

$$t_0 = \frac{\varrho_c}{\dot{\varrho}}$$

idő alatt áll be, az újrakristályosodás pedig

$$t_1 = \frac{R}{v}$$

idő alatt zajlik le. A folyamat jellemezhető az

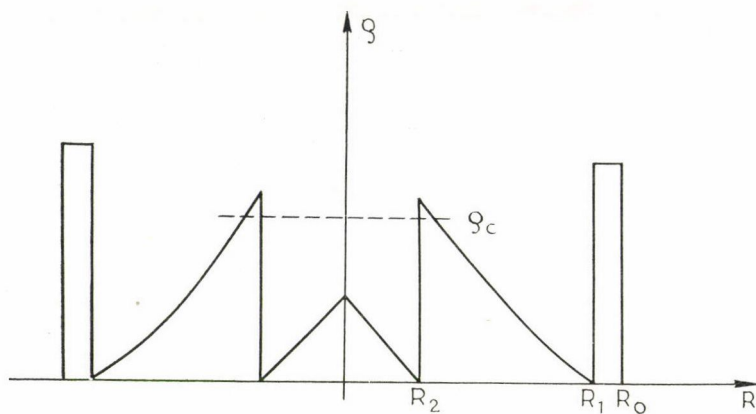
$$a = \frac{t_1}{t_0}$$

paraméter segítségével. Amennyiben a $a < 1$, akkor az egyes újrakristályosodási ciklusok egymástól függetlenül játszódnak le. Ha a $a > 1$, akkor az új rekrisztallizációs ciklus már az előző folyamat befejeződése előtt megindul.

A diszlokációsűrűség alakulását Stüve és Ortner nyomán az 5. ábra mutatja.

$$\bar{\varrho} = \frac{3}{4\pi R^3} \int_0^R \varrho(r) 4\pi r^2 dr$$

összefüggésből határozható meg. $\bar{\varrho}$ ismeretében pedig a folyásfeszültség a (13) egyenlet szerint adódik. A Stüve és Ortner által különböző „a” értékek mellett meghatározott feszültség-megnyúlás függvények oszcilláló görbéket adnak, így kvalitatíve jól tükrözik a dinamikus újrakristályosodásra kapott kísérleti eredményeket.



5. ábra. A diszlokációsűrűség változása Stüve és Ortner modellje szerint

Sandström és Lagneborg az előzőhöz hasonló, de bonyolultabb modelljének eredményei már igen jó egyezést mutatnak a kísérleti tapasztalatokkal [23].

A modell jól tükrözi, hogy a teljes ϱ_t diszlokációsűrűség ϱ homogén, ϱ_d inhomogén részre bontható [26, 27], s a kétféle eloszlás nem azonos mértékben járul hozzá az anyag szilárdításához.

A homogén diszlokációeloszlás a szubszemcsék belsejében alakul ki, az inhomogén eloszlású diszlokációk pedig a cellák falait alkotják. Az újrakristályosodási front mögött mind a homogén, mind az inhomogén diszlokációeloszlás megszűnik, majd az alakítási keményedés és a megújulás hatására újraépül. Ily módon mind a homogén, mind az inhomogén diszlokációsűrűség térben és időben is fluktuál. Ez a fluktuáció a $g(\varrho, t)$ és $G(\varrho_d, t)$ eloszlásfüggvényekkel vehető figyelembe, ahol $g(\varrho, t)d\varrho$ az anyag térfogatának azt a hányadát jelenti, melyben a homogén diszlokációsűrűség a t időpillanatban ϱ és $\varrho+d\varrho$ közé esik. Hasonló módon $G(\varrho_d, t)d\varrho_d$ az anyag azon térfogatrészét jelenti, amelyben az inhomogén diszlokációsűrűség ϱ_d és $\varrho_d+d\varrho_d$ közé esik.

Az újrakristályosodás a Bailey és Hirsch-féle kritérium szerint [28] azokon a szemcsehatárokon indul meg, ahol a határ két oldalán a diszlokációsűrűség különbsége meghaladja a

$$\varrho_c = \frac{4\alpha}{\beta d^*} \quad (32)$$

kritikus értéket. Itt α a határ felületegységére jutó energia, β az egységnyi diszlokációs szakasz energiája, d^* az újrakristályosodási csíra átmérője. A határmozgás sebessége a

$$v(\varrho) = m\beta\varrho \quad (33)$$

egyenlettel adható meg, ahol m a határ mozgékonysága.

Az újrakristályosodás hajtóerejéhez mind a homogén, mind az inhomogén diszlokációk hozzájárulnak, azonban a kísérleti tapasztalatok szerint $\varrho_d \gg \varrho_c$. Így az újrakristályosodási vizsgálatokhoz elegendő a mozgó határ előtti ϱ_d diszlokációs sűrűséget figyelembe venni. (A határ mögött a diszlokációs sűrűség zérus.) Ezek figyelembevételével az újrakristályosodás sebessége a

$$\frac{df}{dt} = \int_{\varrho_c}^{\infty} \frac{v\varrho_d}{D} v(\varrho_d) G(\varrho_d, t) d\varrho_d \quad (34)$$

összefüggéssel adható meg, ahol γ_d a mozgásképes szemcsehatárhányad, D az átlagos szemcseméret és $v \sim 3$.

Az újrakristályosodási front mögött a diszlokációs szerkezet újjászerveződése lényegében a megújulási modellek tárgyalása során ismertetett (15) és (16) egyenletekkel írható le. Célszerű azonban figyelembe venni, hogy a szubhatárokon a megújulási folyamat szerepe elhanyagolható. Így a homogén diszlokációs sűrűség időbeli változása a

$$\frac{d\varrho}{dt} = \frac{\dot{\varepsilon}}{bl} - 2M\beta\varrho^2 \quad (35)$$

egyenlettel, az inhomogén diszlokációs sűrűségé pedig a

$$\frac{d\varrho_d}{dt} = \frac{\dot{\varepsilon}}{bl_d} \quad (36)$$

egyenlettel határozható meg. Az egyenletekben l a homogén, l_d az inhomogén diszlokációk átlagos szabad úthossza.

A diszlokációk térfogati eloszlását jellemző $g(\varrho, t)$ és $G(\varrho_d, t)$ függvények meghatározhatók, ha figyelembe vesszük, hogy a térfogati eloszlás időbeli változása a

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{keményedés + megújulás}} + \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{újrakristályosodás}} \quad (37)$$

tagokra bontható. A jobb oldal két tagja pedig a

$$\left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{keményedés + megújulás}} = - \frac{\partial}{\partial \varrho} \left(g \frac{\partial \varrho}{\partial t} \right) \quad (38)$$

és

$$\left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{\text{újrakristályosodás}} = \begin{cases} -v\gamma_d v(\varrho_d) g \varrho_d & \varrho_d > \varrho_c \\ 0 & \text{ha } \varrho_d < \varrho_c \end{cases} \quad (39)$$

alakban adható meg.

A (35) és (36) egyenletek felhasználásával a (37) összefüggés a

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \varrho} \left(g \frac{1}{bl} \frac{d\varepsilon}{dt} - 2M\beta\varrho^2 \right) + \frac{v\gamma_d}{D} m\beta\varrho_d \theta (\varrho_d - \varrho_c) g = 0 \quad (40)$$

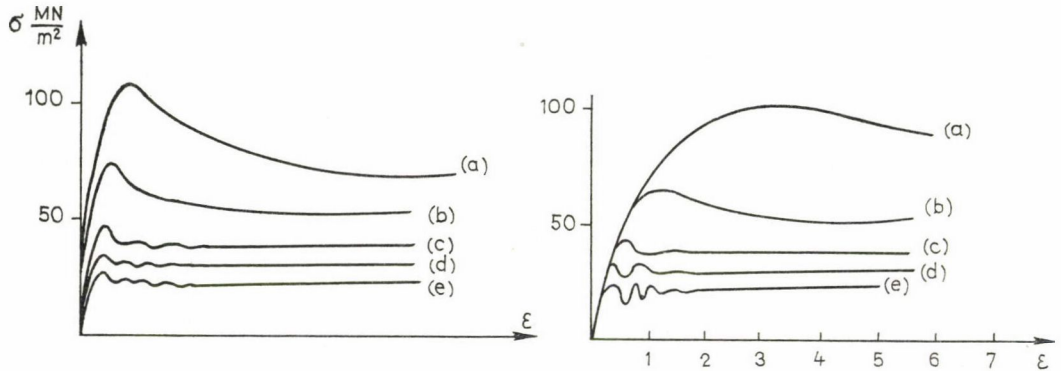
formára írható át. Hasonló módon származtatható az inhomogén diszlokációeloszlásra vonatkozó

$$\frac{\partial G}{\partial t} = \frac{1}{bld} \frac{d\varepsilon}{dt} \frac{\partial G}{\partial \varrho_d} + \frac{v\gamma_d}{D} m\beta\varrho_d \Theta (\varrho_d - \varrho_c) G = 0 \quad (41)$$

egyenlet is. (A (40) és (41) egyenletekben Θ a Heaveshide-operátor.)

A (40) és (41) egyenletek számítógép segítségével megoldhatók, s így meghatározható az újrakristályosodás sebessége, valamint az átlagos diszlokációsűrűség.

Sandström és Lagneborg a modell alapján vasra és nikkre vonatkozó feszültség-megnyúlás összefüggéseket határozott meg. Az elméleti értékek kiváló egyezést mutattak Glover és Sellars, valamint Luton és Sellars kísérleti eredményeivel (6. ábra).

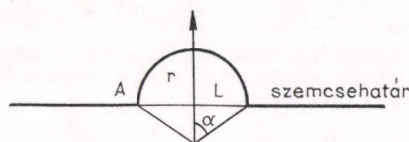


6. ábra. Tiszta nikkal feszültség-megnyúlás görbéi 934 °C-on különböző $\dot{\varepsilon}$ értékek mellett (a) 3,96, (b) 0,495, (c) $6,60 \cdot 10^{-2}$, (d) $1,63 \cdot 10^{-2}$, (e) $2,06 \cdot 10^{-3}$. Balra: Luton és Sellars kísérleti eredményei, jobbra: Sandström és Lagneborg elméleti eredményei

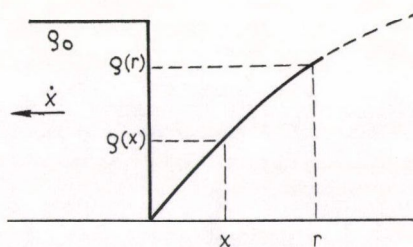
3.2.2. A csíráképződés leírása

A kísérleti tapasztalatok szerint a dinamikus újrakristályosodás megindulása csak egy kritikus megnyúlás (esetleg feszültség) elérése után következhet be. A kritikus érték hőmérséklet vagy alakítási sebesség függésére vonatkozóan azonban sem kísérleti tapasztalatok, sem elméleti becslések nem állnak rendelkezésre.

Elméletileg könnyebben kezelhető Sandström és Lagneborg [29], valamint Roberts és Ahlblom [5] modellje, amely szerint a dinamikus újrakristályosodáskor a mozgó nagyszögű szemcsehatárok mögött újra kialakuló diszlokációszerkezet fékezi a határ mozgását. Az újrakristályosodás csak azon határok mentén jöhet létre, ahol a potenciális csíra határának sebessége nagy a diszlokációk felhalmozódásának sebességéhez képest.



7. ábra. A szemcsehatár kihajlási mechanizmus vázlata



8. ábra. A diszlokációsűrűség változása az újrakristályosodási front mögött

Kísérleti tapasztalatok szerint a dinamikus újrakristályosodás eleve létező szemcsehatárok kihajlásával kezdődik [15]. Roberts és Ahlblom szemcsehatár kihajlási modellje szerint (7. ábra) a szabadenergia változása a

$$\Delta G(r) = -\frac{1}{3} \pi \frac{L^3 \sin^2 \alpha}{(1 + \cos \alpha)^2} \left(\frac{3}{\sin \alpha} - \frac{\sin \alpha}{1 + \cos \alpha} \right) \frac{\beta}{r} \int_0^r (\varrho_0 - \varrho(x)) dx + \frac{2\pi L^2 S}{1 + \cos \alpha} - \pi L^2 S$$

összefüggéssel adható meg, ahol S a szemcsehatár fajlagos energiája, β az egységnyi diszlokáció szakaszra jutó energia. Az

$$\frac{1}{r} \int_0^r (\varrho_0 - \varrho(x)) dx$$

kifejezés az átlagos diszlokációsűrűséget adja a nukleus belsejében. (A diszlokációsűrűség változását a szemcsehatártól mért távolság függvényében a 8. ábra mutatja.) A többi betűk jelentése a 7. ábráról leolvasható. A csíráképződési feltétel $\Delta G(r)$ maximális értékének meghatározásából származtatható.

Amennyiben pusztán a keményedést vesszük figyelembe, akkor a kritikus diszlokációsűrűségre a

$$\varrho_0 \cong \left(\frac{20S\dot{\epsilon}}{3blm\beta^2} \right)^{1/3} = \varrho_{0c} \quad (42)$$

a csíra kritikus átmérőjére pedig a

$$d_c = 2L_c = \frac{6blm\beta}{5\dot{\epsilon}} \varrho_{0c}^2 \quad (43)$$

kifejezés adódik [15]. A megújulás diszlokációsűrűségre gyakorolt hatásának figyelembevétele bonyolult, csak számítógép segítségével megoldható egyenletre vezet. A tárgyalt modell sok tekintetben túlegyszerűsített, azonban egyes kísérleti tapasztalatokat minőségileg helyesen tükröz.

3.2.3. Újrakristályosodási kinetikák

A dinamikus újrakristályosodás során az újrakristályosodott hányad időbeli változását először [14] szerzői határozták meg. Kísérleti úton a sztatikus rekrisztallizációval formailag azonos

$$X = 1 - e^{-kt^n} \quad (44)$$

összefüggéshez jutottak. A formulában X az újrakristályosodott hányad, t az idő, k és n pedig állandók.

Ehhez az összefüggéshez hasonló kifejezés adódik Sandström és Lagneborg modellje alapján a (34) egyenlet integrálásából.

Legújabban Roberts és munkatársai foglalkoztak ezzel a problémával [15], Cahn szemcsehatáron nukleálódó reakciókra vonatkozó elméletét [30] adaptálták az újrakristályosodás problémájára. A kinetika meghatározása során figyelembe vették az ismételt csiraképződést is és jó egyezést kaptak az ausztenites acél esetén kísérletileg meghatározott függvényvel.

IRODALOM

1. H. Mecking and F. Kirch, Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner), Riederer-Verlag, Stuttgart, 1971. p. 257.
2. H. Mecking and G. Gottstein, Recrystallization of Metallic Materials, (ed. F. Haessner, Riederer Verlag, Stuttgart, 1978. p. 195.
3. M. J. McQueen and J. J. Jonas, Treatise of Materials Science and Technology, (ed. R. J. Arsenault), Academic Press, New York, Vol. 6. 1975, p. 393.
4. M. J. McQueen and B. Baudelet, Strength of Metals and Alloys, (eds. P. Haasen, V. Gerold and G. Kostorz), Pergamon Press, Oxford, Vol. I. 1979. p. 329.
5. M. J. McQueen, Met. Trans., 8A. 807, 1977.
6. C. M. Sellars, Phil. Trans. R. Soc. Lond., A288, 147, 1978.
7. K. J. Gardner and R. Grimes, Met. Sci., 13, 216, 1979.
8. G. Glover and C. M. Sellars, Met. Trans. 4, 765, 1973.
9. I. G. Morris and B. J. Roopchand, Mater. Sci. Eng., 17, 57, 1975.
10. R. J. McElroy and Z. C. Szekpiak, Int. Met. Rev., 17, 175, 1972.
11. Tasnádi P. és Rajkovits Zs., Magy. Fiz. Foly. 24, 235, 1981.
12. Rajkovits Zs. és Tasnádi P., Magy. Fiz. Foly. 24, 255, 1981.
13. M. J. McQueen and S. Bergerson, Met. Sci. J. 6, 25, 1972.
14. M. I. Luton and C. M. Sellars, Acta. Met. 17, 1033, 1969.
15. W. Roberts, M. Bodén and B. Ahlblom, Met. Sci. 13, 195, 1979.
16. H. Mecking and K. Lücke, Acta Met. 17, 279, 1969.
17. K. Lücke and H. Mecking, The Inhomogeneity of Plastic Deformation, (ed. R. E. Reed-Hill), ASM, Metals Park, Ohio, 1973, p. 223.
18. J. P. Hirth and J. Lothe: Theory of Dislocations, McGraw-Hill, New York, 1968.
19. J. Friedel: Dislocations, Pergamon Press, Oxford, 1964.
20. U. F. Kocks and H. Mecking, Strength of Metals and Alloys, (eds. P. Haasen, V. Gerold and G. Kostorz), Pergamon Press, Oxford, 1979. Vol. I. 345.
21. U. F. Kocks, H. S. Chen, D. A. Rigney and R. I. Schaefer, Work Hardening, Gordon and Beach, 1968. p. 151.
22. H. P. Stüwe and B. Ortner, Met. Sci. 8, 161, 1974.
23. R. Sandström and R. Lagneborg, Acta Met. 23, 387, 1975.
24. W. Roberts and B. Ahlblom, Acta Met. 26, 801, 1978.
25. I. P. Sah, G. J. Richardson and C. M. Sellars, Met. Sci. 8, 325, 1974.
26. M. F. Ashby, Phil. Mag. 21, 399, 1970.
27. M. F. Ashby, Strengthening Meth. in Cryst. (eds. A. Kelly and R. B. Nicholson), Elsevier, Amsterdam, 1971, p. 137.
28. R. Bailey and P. B. Hirsch, Proc. Roy. Soc. A267, 11, 1962.
29. R. Sandström and R. Lagneborg, Scripta Met. 2, 59, 1975.
30. J. W. Cahn, Acta Met. 4, 449, 1956.

KRISTÁLYSTRUKTÚRÁK CSOPORTELMÉLETE II. TÉRCSOPORTOK*

MORLIN ZOLTÁN

MTA Kristályfizikai Kutató Laboratórium

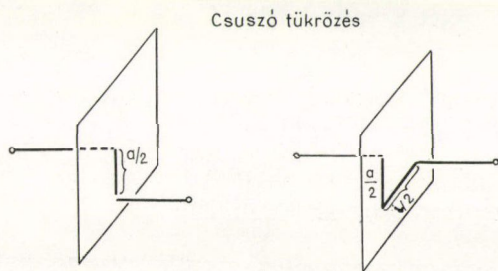
Bevezetés

A pontcsoportok kombinációjához három szimmetria elem (forgástengely, szimmetriacentrum, tükrösík) és ennek megfelelően három szimmetriaművelet (rotáció, inverzió, tükrözés) szükséges. Az egyes szimmetriaműveletek algebrai csoportok elemeinek tekinthetők és így a csoportelmélet alkalmazásával a 32 kristallográfiai pontcsoport felépíthető. A pontcsoportoknak a Bravais-rácsokkal, továbbá translációkkal való kombinációja állítja elő a 230 tércsoportot. A translációknak rotációval való kombinációi a csavartengelyt, tükrözéssel való kombinációi pedig a csúszótükröt generálják. Így a translációkkal kombinált pontcsoportokkal gerjesztett tércsoportok előállításához öt szimmetriaműveletre és ezek kombinációira van szükség.

Minden tércsoport, melynek rotációja egy adott pontcsoport rotációjának felel meg, izogonális ezzel a pontcsoporttal.

Bár a lehetséges csúszó és rotációs translációkat ismertnek tételezzük fel, a translációs szimmetriaelemeket az 1.1. és 1.2. ábrák a teljesség kedvéért összefoglalják. Az ábrából kitűnik, hogy a makroszkopikusnak tekinthető pont-csoport szimmetria műveletekhez képest a translációk atomi méretűek és elemi cellákra szorítkoznak. A tércsoportokkal kapcsolatos egyes jelöléseket az 1. sz. Függelék tartalmazza.¹

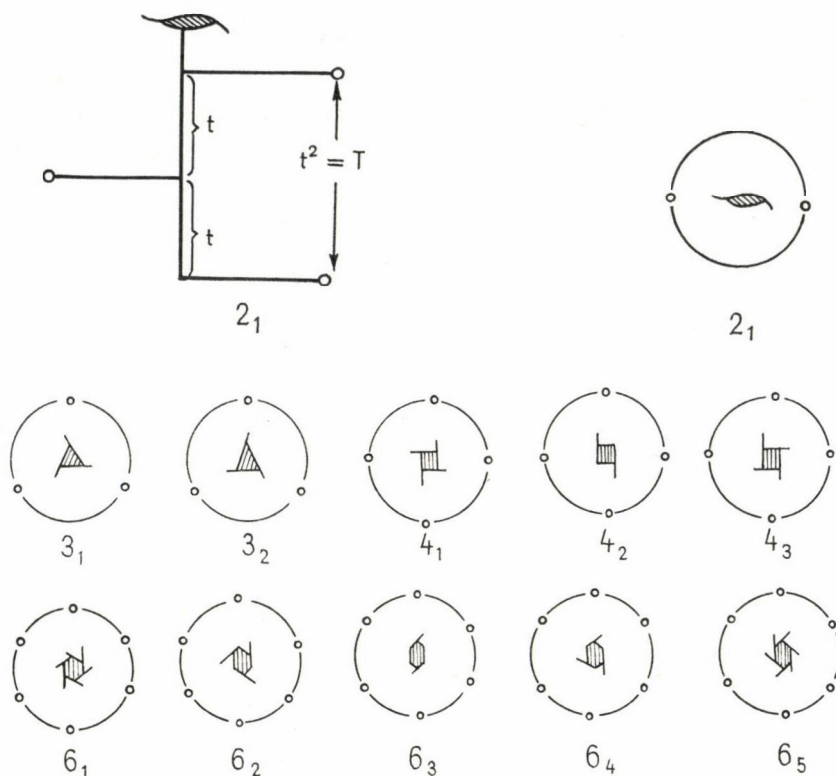
Tekintetbe véve a 32 pontcsoportnak a Bravais-rácsokkal és translációkkal lehetséges valamennyi kombinációját, nyilvánvaló, hogy a 230 tércsoport hagyomá-



1.1. ábra

* Érkezett 1981. ápr. 11.

¹ L. Függelék.



1.2. ábra

nyos levezetése komplex és hosszadalmas feladat. A csoportelmélet segítségével a bonyolult szimmetria viszonyok egyszerűbbé és áttekinthetőbbé válnak. Ennek a tanulmánynak célja éppen a csoportelmélet ilyen irányú kristallográfiai alkalmazásának bemutatása.

Az I. részben bevezetett csoportelméleti fogalmakat és műveleteket kiegészítjük.

1. Faktorcsoportok, homomorf és izomorf leképezés

Legyen H egy G csoport invariáns részcsoportja és legyen G a H részcsoport egész számú többszöröse ($H \triangleleft G$). Az invariancia miatt H egy elemének G egy elemével képzett mellékosztálya kommutál.

$$h_j \cdot g_i = g_i \cdot h_j \quad (g_i \in G)$$

Egy invariáns részcsoport mellékosztályai olyan csoportot generálnak, melynek identitás eleme az invariáns részcsoport.¹

¹ L. a 2. Függelék.

Legyen $h_1, h_2, \dots \in H$ invariáns részcsoporthja $g_1, g_2, \dots \in G$ -nek.

A mellékosztályképzés a következő összeállításhoz vezet ($g_1 = h_1 = I$)

G	G/H	
$I, \quad h_2, \quad h_3, \quad \dots h_s$	H	
$g_2, \quad g_2 h_2, \quad g_2 h_3, \dots g_2 h_s$	$g_2 H$	2.1
$g_3, \quad g_3 h_2, \quad g_3 h_3, \dots g_3 h_s$	$g_3 H$	
\vdots	\vdots	
$g_i, \quad g_i h_2, \quad g_i h_3, \dots g_i h_s$	$g_i H$	

A G -ből vett reprezentánsoknak H elemeivel való szorzata a G csoportot állítja elő, ugyanakkor a reprezentánsoknak a H részcsoporthal való szorzata egy másik csoportot az ún. *faktor csoportot* generálja, ennek jelölése G/H . A faktorcsoporth elemei maguk is csoportok, egységeleme a G invariáns részcsoporthja, vagyis H .

2.1.-ben a G minden sorának a G/H egyetlen eleme felel meg, ezt másképpen úgy fejezzük ki, hogy G egy-egy sorának valamennyi elemét a G/H csoport egyetlen elemére képezzük le:

$$\begin{array}{lcl}
 I, & h_2, & h_3, \quad h_4, \quad \dots h_s \rightarrow H = I \\
 g_2, & g_2 h_2, & g_2 h_3, \quad g_2 h_4, \dots g_2 h_s \rightarrow g_2 H \\
 g_3, & g_3 h_2, & g_3 h_3, \quad g_3 h_4, \dots g_3 h_s \rightarrow g_3 H \\
 \vdots & & \\
 g_i, & g_i h_2, & g_i h_3, \quad g_i h_4, \dots g_i h_s \rightarrow g_i H
 \end{array} \quad 2.2$$

ez a *homomorf leképezés*.

A G/H faktorcsoporth szorzótáblája:

	H	$g_2 H$	$g_3 H$	$\dots g_i H$	
H	H	$g_2 H$	$g_3 H$	$\dots g_i H$	2.3
$g_2 H$	$g_2 H$	$g_2^2 H$	$g_2 g_3 H$	$\dots g_2 g_i H$	
$g_3 H$	$g_3 H$	$g_3 g_2 H$	$g_3^2 H$	$\dots g_3 g_i H$	
\vdots	\vdots				
$g_i H$	$g_i H$	$g_i g_2 H$	$g_i g_3 H$	$\dots g_i^2 H$	

A szorzótábláról leolvasható, hogy a G/H faktorcsoporthon valamennyi csoport-axióma teljesül:

1. Identitása: H .

2. Két elem szorzata szintén eleme a csoportnak (pl. $g_3 H \cdot g_2 g_3 H = g_2 g_3^2 H \cdot H = g_2 g_3^2 H$).

3. Minden elemnek van inverze, melynek az elemmel képzett szorzata H . (Pl. $(g_3 g_i H)(g_3 g_i H)^{-1} = H$).

Példaképpen tekintsük a kristallográfiai C_{2v} ($2/m$) pontcsoportot, $G = \{1, 2, i, m\}$. G -nek egy részcsoporthja

$$H = \{1, 2\}.$$

Legyen $g_1 = 1$ és $g_2 = \bar{1}$.

2.3. mintájára

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc}
 & g_1 H & g_2 H \\
 g_1 H & \left| \begin{array}{cc} g_1 H = 1\{1, 2\} & g_1 g_2 H = 1 \cdot \bar{1}\{1, 2\} \\ g_2 H & \left| \begin{array}{cc} g_2 H = \bar{1}\{1, 2\} & g_2^2 H = \bar{1}^2\{1, 2\} \end{array} \right. \end{array} \right.
 \end{array}
 \end{array}
 \quad 2.4$$

Kifejtve

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc}
 & 1\{1, 2\} & \bar{1}\{1, 2\} \\
 1\{1, 2\} & \left| \begin{array}{cc} 1(1, 2) & 1\{1, 2\}\bar{1}\{1, 2\} \\ \bar{1}\{1, 2\} & \left| \begin{array}{cc} \bar{1}(1, 2)1\{1, 2\} & \bar{1}\{1, 2\}\bar{1}\{1, 2\} = \bar{1}^2\{1, 2\} \end{array} \right. \end{array} \right.
 \end{array}
 \end{array}
 \quad 2.5$$

Részletezve:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc}
 & 1 & 2 \\
 \bar{1} & \left| \begin{array}{cc} \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & \left| \begin{array}{cc} \bar{2} & 2.2 \end{array} \right. \end{array} \right. = \bar{1}, m \\
 & \bar{1} & \bar{2} \\
 1 & \left| \begin{array}{cc} \bar{1} & \bar{2} \\ 2 & \left| \begin{array}{cc} \bar{2} & 2.\bar{2} \end{array} \right. \end{array} \right. = \bar{1}, m \\
 & \bar{1} & \bar{2} \\
 \bar{1} & \left| \begin{array}{cc} 1 & 2 \\ 2 & \left| \begin{array}{cc} 2 & 2.\bar{2} \end{array} \right. \end{array} \right. = 1, 2
 \end{array}
 \end{array}$$

A végeredmény tehát 2.5.-ből:

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc}
 & 1\{1, 2\} & \bar{1}\{1, 2\} \\
 1\{1, 2\} & \left| \begin{array}{cc} \{1, 2\} & \{\bar{1}, m\} \\ \bar{1}\{1, 2\} & \left| \begin{array}{cc} \{\bar{1}, m\} & \{1, 2\} \end{array} \right. \end{array} \right.
 \end{array}
 \end{array}$$

Innen a faktorcsoport

$$\frac{G}{H} = [\{1, 2\}, \{\bar{1}, m\}]$$

Az első elem identitás ($I = \{1, 2\}$), mivel a két elem szorzata $\{1, 2\}\{i, m\} = I\{i, m\}$ kielégíti az identitási axiómát; a szorzási és inverz kombinációkra vonatkozó axiómák teljesülése közvetlenül belátható és érvényes a $H \triangleleft G$ feltétel is, mivel a G csoport és H részcsoporthja rendjének hányadosa egész szám. Végül a G csoport $g_i g_j$ elemei valamennyi szorzatának egyetlen $g_i g_j H$ elem felel meg.

Összefoglalva egy G csoport homomorf (hasonló) egy G/H csoporttal, ha

1. a G minden egyes elemének a G/H csoportnak egy-egy eleme felel meg és a megfeleltetés olyan, hogy a G -beli $g_i g_j$ szorzatnak egy H -beli $g_i g_j$ szorzat felel meg (művelettartó leképezés), ahol

$$g_i \rightarrow g_i H, \quad g_j \rightarrow g_j H, \quad g_i g_j H \rightarrow g_i g_j H,$$

A homomorfia lehetővé teszi egy összetettebb G csoport szorzási törvényeinek egy G -vel homomorf jóval kisebb elemszámú G/H faktor csoport szorzási törvényein való tanulmányozását.

Az I. részben szó esett az izomorfizmusról, melyet most a homomorf leképezés speciális esetének tekinthetünk.

2. Végtelen csoportok

Ha egy csoport végtelen sok elemet tartalmaz, végtelen rendű. Ilyen végtelen rendű csoportokat alkotnak a t_1, t_2, t_3 vektorokkal leírt krisztallográfiai elemi tranzlációk, mivel elvileg nincs akadálya annak, hogy egy-egy tranzláció a háromdimenziós térben végtelen sokszor megismétlődjék. Makroszkopikus kristályok elemi tranzlációi a rácsállandók, így a kristályok tranzlációs csoportjai 10^{-8} – 10^{-7} cm nagyságrendűek.

Minden olyan csoport, amelynek műveletei tranzlációkat tartalmaznak, ily módon végtelen rendű csoport.

Vizsgáljuk meg egy csúszó (tranzlációs) tükrözést (m_t) és ennek hatványait. A csoport:

$$G = \{1, mt, m^2 \cdot t^2, m^3 \cdot t^3, m^4 \cdot t^4, \dots\}, \quad 2.6$$

mivel $m^2 = 1$, 2.6 így írható:

$$G = \{1, mt, t^2, m^2 \cdot m^1 \cdot t^3, m^2 \cdot m^2 \cdot t^4, \dots\} = \{1, m \cdot t, t^2, m \cdot t^3, t^4, \dots\} \quad 2.7$$

Az 1.2. ábra alapján $t^2 = T$, innen 2.7 helyett a csoport elemei

$$1, mt, T, mt \cdot T, T^2, mt \cdot T^2$$

Átrendezés után

$$G = \begin{Bmatrix} 1 & T & T^2 & T^3 \\ m \cdot t & mt \cdot T & mt \cdot T^2 & mt \cdot T^3 \end{Bmatrix} \quad 2.8$$

2.8 első sora a G csoport részcsoporthja:

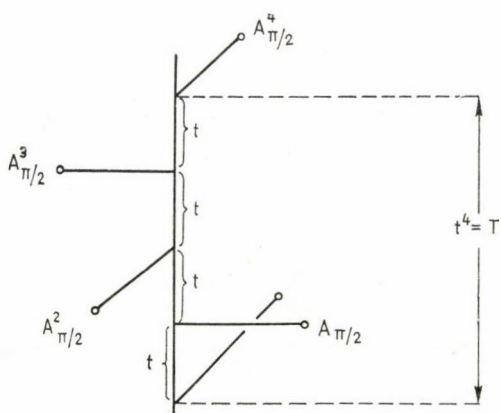
$$H = \{1, T, T^2, T^3, \dots\}$$

és a G csoport az mt elemnek a H invariáns részcsoporthal való szorzataként fogható fel:

G				G/H
1	T	T^2	T^3	H
mt	$mt \cdot T$	$mt \cdot T^2$	$mt \cdot T^3$	$mt \cdot H$

A G/H tehát faktor csoport: $\{G/H\} = \{H, mt \cdot H\}$, melynek egységeleme $\{H\} = \{1, T, T^2, T^3, \dots\}$. A $\{G\} = \{mt\}$ tranzlációs csoport, e csoport faktorcsoporthja és az $\{m\}$ pontcsoport összehasonlíthatók

$\{G\}$				G/H	$\{m\}$	
1	T	T^2	T^3	H	1	2.10
mt	$mt \cdot T$	$mt \cdot T^2$	$mt \cdot T^3$	$mt \cdot H$	m	



2.1. ábra

2.10.-ből közvetlenül belátható, hogy a $\{G\}$ tércsoportból mellékosztály képzéssel előállított G/H faktorcsoporthomomorf m -el és izomorf a G csoporttal.

Minden tranzlációt is tartalmazó ciklikus csoport szimmetriaműveletei homomorfak a velük izogonális pontcsoport szimmetriaműveleteivel.

Tekintsük példaképpen a $\{4_1\}$ tércsoportot és a vele izogonális $\{4\}$ pontcsoportot. A $\{4_1\}$ gerjesztő eleme $B_{\pi/2} \cdot t$, továbbá négy-fogású 4_1 típusú csavartengely esetében $t^4 = T$. (2.1. ábra.)

1. A motívum egy teljes 2π elforgatása $4t = T$ (vagy jelölésünkkel $t^4 = T$)-vel viszi feljebb a motívumot. Egy teljes körforgás tehát ismétléssel a motívumot egy t tranzlációval mindig feljebb és feljebb viszi

$$4t + 4t + 4t = t^4 + t^4 + t^4 \dots = T + T + T = T^3.$$

2. Ugyanez történik a motívum $\pi/2$ tovább forgatásával, minden egyes $\pi/2$ tovább forgatás t -vel emel.

3. Ugyanígy π -vel forgatva az emelés $t + t = t^2$.

4. $3\frac{\pi}{2}$ -vel tovább forgatva az emelés $t + t + t = t^3$.

Tekintsük először a teljes $4\frac{\pi}{2} = 2\pi$ körforgást

$$B_{\pi/2}^4 = B_{2\pi} = 1$$

Ez a rotáció egy teljes $t^4 = T$ tranzlációt jelent. A tranzláció végtelen csoportot alkot:

$B_{2\pi} + 0$ emelés = 1 (nincs tranzláció),

$B_{2\pi} + T$ emelés = T tranzláció,

$B_{2\pi} + 2T$ emelés = T^2 tranzláció stb.

Az elemi cellán belül

$B_{\pi/2} + 0 = B_{\pi/2}$: tranzláció nincs,

$B_{\pi/2} + t = B_{\pi/2} \cdot t$ ez kombinálható T -vel, mert $B_{\pi/2} \cdot t$ minden T -ben ismétlődik:

$$B_{\pi/2} \cdot t \cdot T,$$

$B_{\pi/2}^2 + 2t = B_{\pi/2}^2 \cdot t^2$ kombinálható T -vel: $B_{\pi/2}^2 \cdot t^2 \cdot T,$

$B_{\pi/2}^3 + 3t = B_{\pi/2}^3 \cdot t^3$ kombinálható T -vel: $B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 \cdot T,$

majd ugyanezek a kombinációk folytathatók T^2 -tel, T^3 -al stb.

Látható, hogy

$$\{1, T, T^2, \dots\} = H$$

a $\{4_1\}$ -nek egy invariáns részcsoportha (a tranzlációk a kristályszerkezeten nem változtatnak).

Továbbá

$$\{4\} = \{1, B_{\pi/2}, B_{\pi/2}^2, B_{\pi/2}^3\}.$$

Csavartengely esetén, ha t egy menetemelkedés és $t^4 = T$

$$B_{\pi/2} \cdot t, B_{\pi/2}^2 \cdot t^2, B_{\pi/2}^3 \cdot t^3, B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 (= 1.T),$$

A tranzlációs komponensek hatványai tovább emelhetők, mivel minden tranzlációs csoport végtelen rendű

$$B_{\pi/2}^5 \cdot t^5 = B_{\pi/2} \cdot t \cdot B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 = B_{\pi/2} \cdot t \cdot T$$

$$B_{\pi/2}^6 \cdot t^6 = B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 \cdot B_{\pi/2}^2 \cdot t^2 = B_{\pi/2}^2 \cdot t \cdot T$$

$$B_{\pi/2}^7 \cdot t^7 = B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 \cdot B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 = B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 \cdot T$$

$$B_{\pi/2}^8 \cdot t^8 = B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 \cdot B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 = T^2 \quad (T \cdot T = t^4 \cdot t^4 = T^2, B_{\pi/2}^4 = 1)$$

$$B_{\pi/2}^9 \cdot t^9 = B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 \cdot B_{\pi/2}^5 \cdot t^5 = B_{\pi/2} \cdot t \cdot T^2 \quad \text{s. í. t.}$$

Az elmondottak alapján faktorcsoporthoz képzéssel és a $\{4\}$ pontcsoporttal való összehasonlítás a következő elrendezést szolgáltatja

$G = \{4_1\}$			G/H	$\{4\}^1$
1	T	T^2	H	1
$B_{\pi/2} \cdot t$	$B_{\pi/2} \cdot t \cdot T$	$B_{\pi/2} \cdot t \cdot T^2$	$B_{\pi/2} \cdot t \cdot H$	$B_{\pi/2}$ 2.11
$B_{\pi/2}^2 \cdot t^2$	$B_{\pi/2}^2 \cdot t^2 \cdot T$	$B_{\pi/2}^2 \cdot t^2 \cdot T^2$	$B_{\pi/2}^2 \cdot t^2 \cdot H$	$B_{\pi/2}^2$
$B_{\pi/2}^3 \cdot t^3$	$B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 \cdot T$	$B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 \cdot T^2$	$B_{\pi/2}^3 \cdot t^3 \cdot H$	$B_{\pi/2}^3$

$G = \{4_1\}$ és a mellékosztályképzéssel előállított G/H faktorcsoporthoz egymással homomorf, mivel a G/H faktorcsoporthoz elemei a $\{4_1\}$ vízszintes soraiból álló mellékosztályok. Ugyanakkor a G/H faktorcsoporthoz izomorf a $\{4\}$ pontcsoporttal.

Figyeljük meg továbbá, hogy 2.11 első oszlopa a $\{4_1\}$ részcsoportha, melynek elemei

$$\{L\} = \{1, B_{\pi/2} \cdot t, B_{\pi/2}^2 \cdot t^2, B_{\pi/2}^3 \cdot t^3\}.$$

Ugyanis 2.11 rotációs elemei a $\{4\}$ pontcsoport elemei, az egységelem

$$B_{\pi/2}^4 \cdot t^4 = B_{\pi/2}^4 \cdot T = I \quad \text{és} \quad \{L\}\text{-ben}$$

a tranzlációs komponensek végtelen rendű csoportot képeznek. Ezt az absztrakt algebra nyelvén így írhatjuk

$$T^n = 1 \quad (\text{modulo } I).$$

T valamennyi hatványa az egységnyi tranzláció egész számú többszöröse, 1 jelentése pedig kristallográfiai: nincs művelet.

¹ Figyeljük meg, hogy $\{4\} = \{G^*\}$ nem részcsoportha $\{4_1\} = \{G\}$ -nek, de izomorf G/H -val.

Például, ha

$$T^4 = I,$$

akkor

$$T^8 = T^4 \cdot T^4 = I \cdot I = I,$$

$$T^{12} = T^4 \cdot T^4 \cdot T^4 = I \cdot I \cdot I = I.$$

Ugyanis

$$\frac{T^8}{T^4} = T^4 = I, \quad \frac{T^{12}}{T^4} = T^8 = T^4 \cdot T^4 = I \cdot I = I \quad \text{s.í.t.}$$

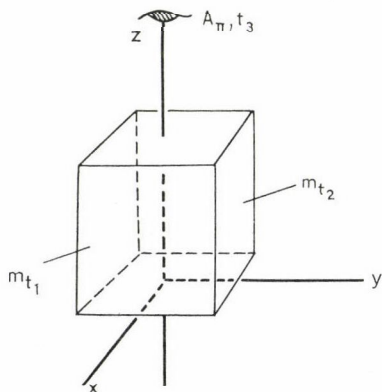
3. Tércsoportok előállítás

Az eddig elmondottakat mindenekelőtt néhány jól ismert krisztallográfiai megfontolással egészítjük ki. Az 1. Bevezetésben röviden megemlítettük, hogy a pontcsoportoknak a Bravais-féle primitív elemi cellákkal való kombinációja szolgáltatja az első tércsoportokat ($P1$, $P2$, $P222$, $Pmm2$ stb.). További tércsoportokat adnak a pontcsoportok kombinációi a felületcentrált (F), lap-, illetve báziscentrált (A , B , C) és tércentrált (I , R) Bravais-féle elemi cellákkal. Mindezekben a tércsoportokban nincsenek csúszótükör vagy csavartengely szimmetria elemek. A tranzlációknak, mint szimmetriaműveleteknek a pontcsoportokkal való kombinációja újabb tércsoportokat eredményeznek. A 230 tércsoport tehát a pontcsoportok P , A , B , C , F , I és R típusú Bravais-cellákkal, továbbá tranzlációkkal (a csúszótükör és csavartengely szimmetriaelemek műveleteivel) való kombinációja állítja elő. Mindebből következik, hogy egy-egy pontcsoporthoz több, a pontcsoportból levezethető, tércsoport tartozik.

Miként az előző fejezetben bemutattuk, egy pontcsoport szimmetria elemének és egy vele izogonális tércsoport faktorcsoportja között izomorf reláció áll fenn. Ha tehát a pontcsoport egy szimmetriaeleméből képzett csoport szorzótáblája ismert, a faktorcsoport szorzótáblája is ismert. Továbbá mind a pontcsoport, mind a tércsoportműveletek rotációs komponense a megfelelő mellékosztályban ugyanaz.

A tranzlációk végtelen csoportot alkotnak, azonban ezek a tranzlációs csoportok úgy is leírhatók, hogy egy véges csoportot alkotnak modulo I , ahol I az elemi rácstranzláció. A tércsoport szimmetriaműveletek rotációs komponensei így egy véges csoport elemei. A tranzlációs csoportok így módon a pontcsoportok műveleteivel együtt egy cellához tartoznak, azonban ki kell elégíteniük azt a követelményt, hogy a tranzlációk véges csoportot képezzenek modulo I , azaz egy olyan csoportot, melyben az Identitás szerepét egy rácstranzláció tölti be. További feltétel a rotációs váz invarianciája, amely megköveteli, hogy az elemi cellán belüli szimmetria elemek elhelyezése ezt a feltételt kielégítse.

Példaképpen tekintsünk néhány a rombos $mm2$ pontcsoportból kialakított tércso-



3.1. ábra

portot. Az $mm2$ pontcsoport elemei

$$\{I, {}^xm, {}^ym, B_\pi\}$$

ahol xm az x -tengelyre, ym az y -tengelyre merőleges tükörsík, B_π pedig — az eddigi jelöléseknek megfelelően — a z tengelyben fekvő két-fogású forgástengely. A továbbiakban B_π jelölése a z -irányú forgástengely fogásszáma, azaz z2 , csavar-tengely esetében a jelölés 2_1 .

A pontcsoport szerkezetét az alábbi szorzótábla mutatja:

$$\begin{array}{c|cccc} & I & {}^xm & {}^ym & {}^z2 \\ \hline I & I & {}^xm & {}^ym & {}^z2 \\ {}^xm & {}^xm & I & {}^z2 & {}^ym \\ {}^ym & {}^ym & {}^z2 & I & {}^xm \\ {}^z2 & {}^z2 & {}^ym & {}^xm & I \end{array} \quad 3.1$$

Az I. rész 2.6, 2.7 és 2.8 egyenletei miatt z2 , és bármely tükörnek z2 -vel való kombinációja a másik tükröt generálja, azaz:

$$\begin{aligned} {}^xm \cdot {}^ym &= {}^z2, \\ {}^xm \cdot {}^z2 &= {}^ym, \\ {}^ym \cdot {}^z2 &= {}^xm \end{aligned} \quad 3.2$$

A tércsoportszimmetria rotációs műveletei izomorfak 3.1.-gyel, mivel az $mm2$ pontcsoportot mellékosztályképzéssel három egymásra merőleges két-fogású tengelyből vezettük le.¹ A rotációs elemek szorzótáblájának tehát meg kell egyeznie a 3.1. szorzótáblával. Így kapjuk meg a tércsoportok rotációs vázát.

A tércsoportoknak az $mm2$ pontcsoportból tranzlációkkal való felépítése az előző fejezetben elmondottak alapján a következőképpen történik. Jelöljük a tranzlációt is tartalmazó csoportot G -vel. A G csoport két részcsoporthból épül fel, az egyik az $mm2$ pontcsoport.

$$H_p = \{I, {}^xm, {}^ym, {}^z2\},$$

Ennek a csoportnak szorzótáblája a már bemutatott 3.1.

A másik részcsoporth a tranzlációs elemeket tartalmazza:

$$H_t = \{I, {}^1t, {}^2t, {}^3t\}.$$

Ennek a csoportnak szorzótáblája

$$\begin{array}{c|cccc} & I & {}^1t & {}^2t & {}^3t \\ \hline I & I & {}^1t & {}^2t & {}^3t \\ {}^1t & {}^1t & I & {}^3t & {}^2t \\ {}^2t & {}^2t & {}^3t & I & {}^1t \\ {}^3t & {}^3t & {}^2t & {}^1t & I \end{array} \quad 3.3$$

ahol ${}^1t \cdot {}^2t = {}^3t$ (modulo I).

¹ L. I. rész.

A G , tranzlációt is tartalmazó, absztrakt (általános) tércsoport előállítása a két részcsoporthól mellékosztályképzéssel történik

G				G/H_t
I	1t	2t	3t	H_t
xm	$^xm^1t$	$^xm^2t$	$^xm^3t$	xmH_t
ym	$^ym^1t$	$^ym^2t$	$^ym^3t$	ymH_t
z2	$^z2^1t$	$^z2^2t$	$^z2^3t$	z2H_t

3.4

A 3.1. és 3.4. összevetéséből látható, hogy a H_p részcsoporthoz és a G/H_t faktorcsoporthoz izomorfak. A G/H_t faktorcsoporthoz szorzótáblája a következő:

	H_t	xmH_t	ymH_t	z2H_t
H_t	H_t	xmH_t	ymH_t	z2H_t
xmH_t	xmH_t	H_t	z2H_t	ymH_t
ymH_t	ymH_t	z2H_t	H_t	xmH_t
z2H_t	z2H_t	ymH_t	xmH_t	H_t

3.5

A 3.5 szorzótáblával képzett csoport elemeinek bináris szorzatai szintén elemei a csoportnak:

$$^xmH_t \cdot ^ymH_t = ^z2H_t. \quad 3.6$$

A H_t az $^1t, ^2t, ^3t$ tranzlációkat tartalmazza. Ezek közül az x -irányú 1t -nek xm -mel való kombinációja kristallográfiailag nem lehetséges, 2t viszont $b/2$, 3t pedig $c/2$ és a kettő együtt $\frac{b+c}{2}$, így 2t és 3t xm -re tranzláció, a kettőt együtt jelöljük t_1 -gyel ($^xmH_t = ^xmt_1$). Ugyanígy ym -re csak az 1t és 3t tranzláció vonatkozik ($a/2, c/2$ és $\frac{a+c}{2}$), a kettőt t_2 -vel jelöljük. Végül z2 -re csak a 3t tranzláció lehetséges ($c/2$), jelölése t_3 . Fentiek alapján 3.6 így írható:

$$^xmt_1 \cdot ^ymt_2 = ^z2t_3. \quad 3.7$$

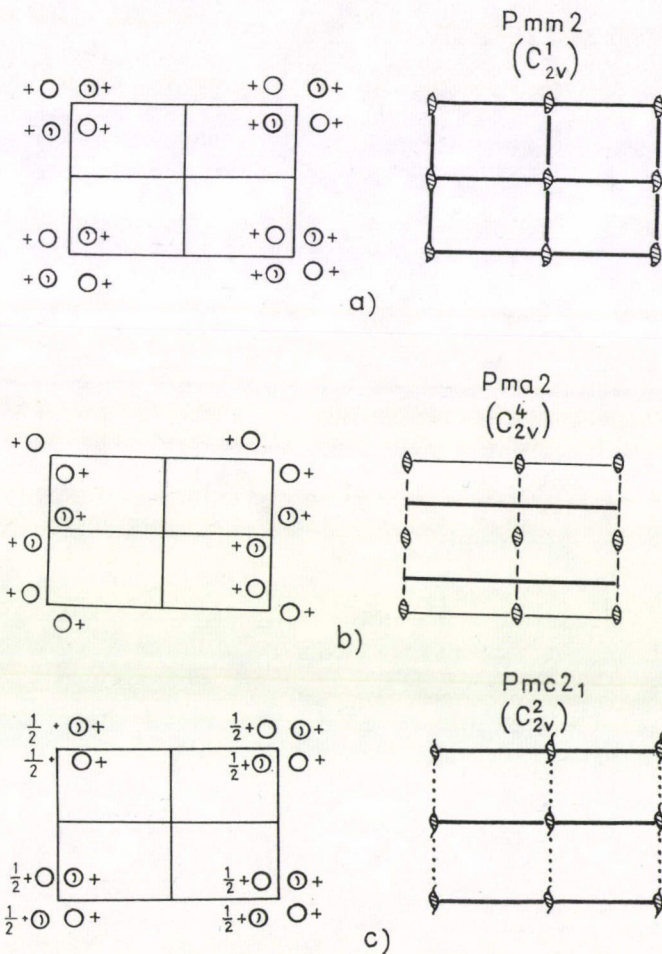
A 3.7. absztrakt tranzlációs egyenlet, melynek alkalmazásánál tekintetbe kell venni, hogy xm esetében $t_1=0$, xm ekkor tükör, továbbá $t_1=b/2, c/2$, illetve $\frac{a+b}{2}$

(ezekben az esetekben xm csúszótükör). Ugyanígy $t_2=0, a/2, c/2, \frac{a+c}{2}$ (a három utóbbi esetben ym csúszótükör). Végül $t_3=0$ vagy $c/2$. Az első esetben z2 forgástengely, a második esetben csavartengely: 2_1 . Továbbá a tranzlációs szimmetrialemeknek az elemi cellában úgy kell elhelyezkedniük, hogy szimmetriaműveleteik a forgástengelyt, illetve csavartengelyt önmagába transzformálják. Ez azt jelenti, hogy egyes konkrét tércsoportokban például a csúszótükör elemek két-két szomszédos forgás (csavar)-tengely közti távolságot felezik, azaz az elemi cellában $x=1/4$,

illetve $y=1/4$ rácsállandó távolságra helyezkednek el. Ugyanez vonatkozik a forgástengelyekre is.¹

Az elmondottak alapján az absztrakt G tércsoportból, illetve 3.7-ből konkrét tércsoportokat kapunk, ha a t_1 -be, t_2 -be, illetve t_3 -ba a lehetséges és a rotációs váz invariancia követelményeit kielégítő tranzlációkat helyettesítjük. Vegyünk néhányat sorba.

1. Ha $t_1=0$, $t_2=0$, $t_3=0$ nincs tranzláció, a tércsoport a primitív rombos ráccsal kombinált mm2 pontcsoport: Pmm2 (3.2a. ábra).²



3.2. ábra

¹ A csúszótükrök és forgás-, illetve csavartengelyek egymáshoz viszonyított helyzetének tárgyalását M. Buerger 3. sz. alatt idézett monográfiája tartalmazza, az egyes tércsoportok vetületei és lényeges adatai pedig az 1. sz. alatt idézett International Tables 1. kötetében találhatók.

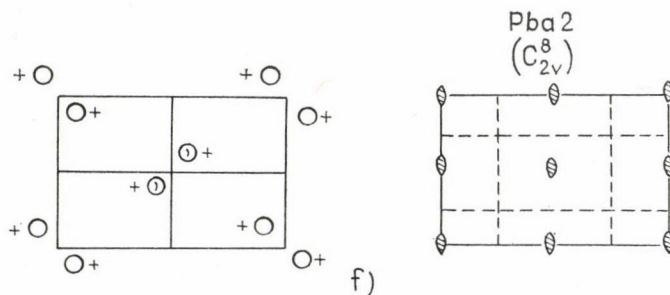
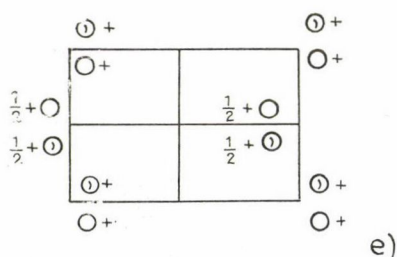
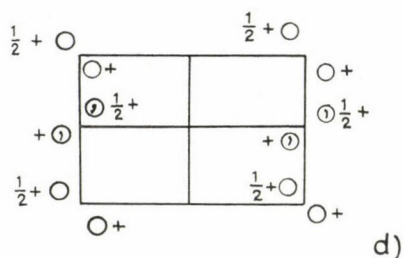
² Az egyes tércsoportokat szemléltető ábrák az International Tables 1. sz. alatt idézett 1. kötetében közölt ábrák.

2. $t_1=0$, $t_2=a/2$, $t_3=0$. Ebben az esetben xm egyszerű tükör; az ym translációs tükörsík: $a/2$ translációval, azaz $^ymt_2=a$. $t_3=0$ miatt z2 egyszerű két-fogású forgástengely. A tércsoport tehát $Pma2$ (3.2b. ábra).

3. $t_1=0$, $t_2=c/2$ és $t_3=c/2$, ezért $^ymt_2=c$ és $^z2t_3=2_1$. A tércsoport: $Pmc2_1$ (3.2c. ábra).

4. $t_1=c/2$, $^xmt_1=c$; $t_2=a/2$, $^ymt_2=a$; $t_3=c/2$, $^z2t_3=2_1$. A tércsoport $Pca2_1$ (3.2d. ábra).

5. $t_1=0$, xm egyszerű tükörsík; $t_2=\frac{a+c}{2}$, $^ymt_2=n$; $t_3=c/2$, $^z2t_3=2_1$. A tércsoport $Pmn2_1$ (3.2e. ábra).

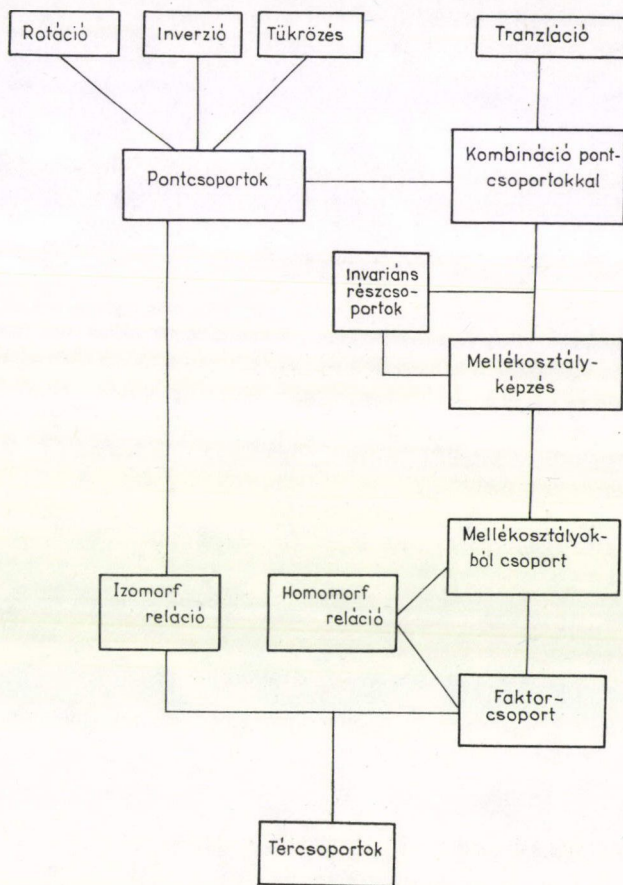


3.2. ábra

6. $t_1=b/2$, ${}^xmt_1=b$; $t_2=a/2$, ${}^ymt_2=a$; $t_3=0$, ${}^z2t_3=2$. A tércsoport $Pba2$ (3.2f. ábra).

A példaképpen bemutatott módon valamennyi tércsoport előállítható (3.3 folyamatábra).

Egy tércsoport részcsoportjainak és az izogonális pontcsoport műveletei ugyanahhoz az elemi cellához tartoznak. *Buerger* kimutatta, hogy léteznek olyan részcsoportok is, melyek az elemi cellánál nagyobb egységekre vonatkoznak. A részcsoportok együttesét, elemi cellára való vonatkozás nélkül, *Buerger* nyomán derivált szimmetriáknak nevezik¹. Ezek ismertetése azonban meghaladja jelen értekezés kereteit.



3.3. ábra

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Őszinte köszönetemet fejezem ki *Dr. Sasvári Kálmán*nak az értékes diszkusszióért.

¹ *J. M. Buerger*, *Derivative Crystallography*, *J. Chem. Phys.* **15**, 1—16, 1947.

1. FÜGGELÉK

Tér csoportal jelölések

Elemi cella:

P : primitív, A : 100 lapon centrált, B : 010 lapon centrált,

C : 001 lapon centrált.

F : lapon centrált (A , B és C lapokon centrált),

I : tércentrált,

R : rombohedrális ($2/3$, $1/3$, $1/3$ és $1/3$, $2/3$, $2/3$ pontok a tér diagonálison).

Tranzlációk (csúszósíkok)

m : Szimmetriasík, nincs transláció,

a , b : csúszótükör $a/2$ és $b/2$ translációval,

c : csúszótükör $c/2$ translációval,

n : csúszótükör $\frac{a+b}{2}$, $\frac{b+c}{2}$, $\frac{a+c}{2}$, $\frac{a+b+c}{2}$ translációval,

d : csúszótükör $\frac{a+b}{4}$, $\frac{b+c}{4}$, $\frac{a+c}{4}$, $\frac{a+b+c}{4}$ translációval.

Ábrajelölések:

m : vetület síkjára merőleges tükörsík: _____

a , b : vetület síkjára merőleges csúszótükör:

c : vetület síkjára merőleges csúszótükör:

n : lapdiagonális csúszótükör: .-.-.-.-.

d : térátlós csúszótükör: .-.-.-.-.

.-.-.-.-.

2. FÜGGELÉK

Mivel a rész csoport invariáns

$$g_i \cdot H = H \cdot g_i,$$

továbbá

$$(g_i \cdot H)(g_j \cdot H) = g_i \cdot g_j \cdot H \cdot H = g_i \cdot g_j \cdot H.$$

Tegyük a $g_i \cdot g_j$ szorzatot egyenlővé a mellékosztály valamilyen általános szorzatával

$$g_i \cdot g_j = g_k \cdot h_p,$$

$$g_i \cdot g_j H = g_k \cdot h_p \cdot H.$$

Egy invariáns csoport bármely eleme a csoportot önmagába transzformálja

$$h_p^{-1} \cdot H \cdot h_p = H, \quad h_p \cdot H = H.$$

Ezért

$$g_i \cdot g_j \cdot H = g_k \cdot H.$$

a jobb oldal mellékosztály k -ik sora. Mivel $H \cdot H = H$

$$(g_i \cdot H) \cdot H = g_i \cdot H.$$

Ebből a szorzatból kitűnik, hogy a H rész csoport egy másik csoport eleme. Ezt az állítást az inverzió axióma erősíti

$$g_i \cdot H \text{ inverze } g_i^{-1} H$$

$$(g_i \cdot H)(g_i^{-1} \cdot H) = g_i \cdot g_i^{-1} H \cdot H = H.$$

Egy olyan csoporthoz jutottunk, melynek egységeleme a G csoport invariáns H rész csoportja. Ez a faktor (hányados) csoport, jelölése G/H .

IRODALOM

1. International Tables for *X-Ray Crystallography*.
vol. 1. ed. by *N. F. N. Henry and Kathleen Lonsdale*, XI, 558, 1952.
vol. 2. ed. by *John S. Kasper and Kathleen Lonsdale*, XVIII, 444, 1959.
vol. 3. ed. by *Carolyn H. MacGillavry and Gerard D. Rieke*, general editor Kathleen Lonsdale, XVI, 362, 1962.
Kyrack Press, Birmingham.
2. *W. Kleber*: Einführung in die Kristallographie 5. Aufl., 366, Veb. Ver Technik, Berlin, 1961.
3. *Martin Buerger*: Elementary Crystallography, XXIII, 528, The MIT Press, Cambridge, Mass., sacusets and London, 1978.
4. *A. V. Shubnikov and V. A. Koptsik*: Symmetry in Science and Art (Szimmetrija v nauke i isskustre translated by G. D. Archard) XXV, 420, Plenum Press, New York and London, 2nd printing, 1977.
5. *M. P. Saszkolszkaja*: Krisztallografija, 302, Vjiszszaja Skola, Moszkva, 1976.
6. *Carl W. Correns*: Einführung in die Mineralogie, zweite Aufl., XII, 458, Springer Verl. Berlin, New York, 1968.
7. *Náray-Szabó I.*: Kristálykémia, 514, Akadémiai Kiadó Budapest, 1965.
8. *M. M. Woolfson*: An Introduction to *X-Ray Crystallography*, IX, 380, University Press, Cambridge, 1970.
9. *L. V. Azaroff*, Elements of *X-Ray Crystallography*, XVI, 610, McGraw-Hill, New York, 1968.
10. *M. F. C. Ladd, R. A. Palmer*: Structure Determination by *X-Ray Crystallography*, XVI, 393, Plenum Press, New York, London, 1977.
11. *W. L. Bond*: Crystal Technology, XI, 342, John Wiley, New York, 1976.
12. *R. Keown*: An Introduction to Group Representation Theory, XI, 331, Academic Press, New York, London, 1975.
13. *Wigner Jenő*, Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában (Group Theory and its Application to Quantum Mechanics of Atomic Spectra, fordította Györgyi Géza és Sebestyén Ákos), 391, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979.

KÖNYVISMERTETÉS

**D. Jagonitzer (ed): Complex Analysis, Microlocal Calculus and Relativistic Quantum Theory
Proceedings of the Colloquium Held at Les Houches, Centre de Physique Sempتمبر 1979
Lecture notes in Physics Vol. 126 Springer-Verlag**

Ez a kötet az 1979 szeptemberében, Les Houches-ban rendezett „Komplex analízis, mikrolokalis számítás és relativisztikus kvantumelmélet” kollokvium előadásait tartalmazza.

A hetvenes években a matematikusok és elméleti fizikusok is érdeklődni kezdtek függvények szingularitás szerkezetének vizsgálata iránt. Mivel a szingularitások leírása egyaránt fontossá vált a komplex analízisben és a relativisztikus kvantumelméletben. Erről a közös témáról már két konferenciát tartottak 1973-ban Nizzában és 1976-ban Kyotóban. Kiderült, hogy az ilyen eszmecserék hasznosak mind a fizikusok, mind pedig a matematikusok számára. Ez a Les Houches-ban tartott kollokvium tovább szélesítette a közös érdeklődési területet.

A kötet anyaga négy fő részre oszlik. Az első két rész főleg matematikai jellegű kérdéseket tárgyal, míg a második kettő fizikai problémák felé irányul.

Az I. rész a mikrofüggvény-elmélet új fejleményeivel, a mikrolokalis, vagy mikrodifferenciális analízissel (holonóm rendszerek, második mikrolokalizáció stb.) és ezzel kapcsolatos további kérdésekkel foglalkozik. Ezek közül D. Jagonitzer, M. Kashiwara, F. Kawai és A. Van Den Essen előadásai közvetlen fizikai alkalmazást is nyerhetnek az analitikus S -mátrix elméletben és a Feynman-integrálok vizsgálatában. Ugyancsak fontos Z. Mebkhout dolgozata, amely a Hilbert–Riemann-probléma többdimenziós esetre való általánosításával foglalkozik. Y. Laurent és P. Schapira a mikrofüggvény elmélet további érdekes kérdéseivel foglalkozik: második mikrolokalizáció és pozitivitási feltételek komplex sokaságokon.

A II. rész más különböző új matematikai eredményekkel foglalkozik: J. M. Bony a parciális differenciálegyenletek megoldásainak szingularitásait, J. Chazarain a Hamilton operátor spektrumának szemiklasszikus közelítését, G. V. Chudnovsky lineáris differenciálegyenletek megoldásainak racionális vagy Padé közelítését, B. Malgrange a stacionárius fázis és a Borel összegzés módszerét vizsgálja. Ezen eredmények egy része szintén fontos fizikai alkalmazást nyerhet.

A III. rész a Green-függvények és az S -mátrix (ütközési amplitúdók) általános analitikus és mikroanalitikus viselkedésének matematikai szigorúságú vizsgálatával foglalkozik az axiomatikus kvantumtérelmélet és az S -mátrix elmélet keretein belül. Ezen a területen jelentős előrelépés történt a sokrészesek folyamatok leírásában. M. C. Bergere a Feynman-integrálok aszimptotikus viselkedését, J. Bros a kvantumtérelméletbeli Green-függvények globális analitikus viselkedését, D. Jagonitzer a mikro- és makrokausalitás szerepét, G. Sommer a kétrészesce amplitúdók analitikus szerkezetét, D. Xia az indefinit metrikájú térelmélet szórási mátrixát és a lokális áramalgebraikat tárgyalják előadásaikban.

A IV. rész az S -mátrix és bizonyos esetekben a Green-függvények meghatározásával foglalkozik különböző kétdimenziós térelméleti modellekben, valamint más olyan fizikai és matematikai kérdéseket vizsgál, amelyek tovább segíthetik az elméleti fizika fejlődését. Azt mondhatjuk, hogy fizikus szemmel ez a legértékesebb része a kötetnek. Három alrészre oszlik.

Az A rész olyan térelmétekekkel foglalkozik, amelyekben szoliton viselkedés van: B. Berg a tömeggel rendelkező Thirring-modell S -mátrixáról és M. Karowski az $1+1$ dimenziós szolitonokat leíró térelméletek alakfaktorairól és Green-függvényeiről írt dolgozatot.

A B. rész D. V. Chudnovsky a többdimenziós teljesen integrálható rendszereket és J. Honerkamp az egzaktul integrálható térelméleti modellek kvantálását leíró előadását tartalmazza.

A C. részben M. Sato, T. Miwa és H. Jimbo, valamint D. B. Abraham Ising modellekkel foglalkozó előadásai találhatók meg.

Az A. és B. rész előadásai különösen hasznosak a teljesen integrálható rendszerekkel foglalkozó olvasók számára.

A kötet a matematika és a fizika távoli témaköreit tartalmazza és így széles érdeklődésre tart hat számot a különböző területeken dolgozó fizikus és matematikus kutatók körében. Az egyetlen hátránya talán az ilyen jellegű összeállításoknak az, hogy valamely speciális témával foglalkozó olvasók számára csak a kötet kisebb része bizonyul érdekessnek. A dolgozatok színvonala rendkívül magas, megértésükhöz az olvasónak sok matematikai és fizikai előismerettel kell rendelkeznie. Ezért csak a speciális szakterületeken dolgozók számára válhat hasznossá a kötet egyes cikkeinek elolvasása. A konferencia-összefoglaló megjelentetése mégis fontos volt, mivel a fizikus és matematikus közösség tudomást szerezhet belőle az elhangzott előadások tartalmáról és az új eredményekről.

Horváth Zsolt

Peter Kramer, Marcos Saraceno:
Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics
Lecture notes in Physics Vol. 140. Springer-Verlag

Ez a kötet a kvantummechanika időfüggő variációs elvének geometriai tartalmát vizsgálja. Ez az elv az időfüggő Schrödinger-egyenletet egy hatásfunkcionálból variálással származtatja le. A Schrödinger-egyenletet úgy kapja, hogy megköveteli, hogy a hatásfunkcionál stacionárius legyen az időfüggő állapot variációira nézve.

A 2. fejezet leírja a variációs elv alapvető vonásait. Megmutatja, hogy véges számú valós vagy komplex paraméter esetén elsőrendű egyenleteket kap, amelyek Hamilton-féle mozgásegyenletekként értelmezhetők. Definálja az ezen Hamilton-féle struktúrának megfelelő általánosított Poisson-zárójeleket. A 3. fejezetben a szerzők a Kostant által bevezetett, Lie-algebrákhoz kapcsolódó szimplektikus struktúrákat írják le.

A 4. fejezet a flegyszerű Lie-csoportok reprezentáció elméletével foglalkozik. Koherens állapotokat vezet be. Ezek felhasználásával az operátorok várható értékei egy adott irreducibilis reprezentáció terén, valamely pályán értelmezett függvényekké válnak a 3. fejezetben leírt szimplektikus struktúrával felruházva.

Az 5. fejezetben a variációs elv és a Lie-algebrák sajátosságainak kapcsolatát vizsgálják. Ha a variációs elvben előforduló paramétereket egy Lie-csoport paramétereinek választjuk, a 3. és 4. fejezetek a variációs elv geometriai értelmezését teszik lehetővé.

A variációs elv úgy értelmezhető, mint áttérés az állapotterébeli időfejlődésről a fázistérre értelmezett trajektóriákra. A fázistér a Lie-csoport valamilyen faktor tere (coset tér), ezen a pályán a Poisson-zárójel nem-degenerált szimplektikus struktúrát ad. A 6–8. fejezetek különböző alkalmazásokat írnak le: Lipkin-modell, időfüggő Hartree–Fock-modell, forgásinvariáns Hamilton-operátorok, forgásinvariáns kéttest Hamilton-operátorok.

A könyv érdekes új megközelítést adja a Schrödinger-egyenlet vizsgálatának. Különösen hasznos, hogy ez a megközelítés lehetővé teszi olyan rendszerek kvantálását is, amelyek paramétereit valamely nem-euklideszi térben adottak (pl. Lie-csoport paraméterek).

A könyv hasznos olvasmány jó matematikai felkészültségű és a kvantumelméletet alaposan ismerő, matematikai fizika kérdéseivel foglalkozó szakemberek számára.

Horváth Zsolt

R. Behrisch: Sputtering by Particle Bombardment
Springer-Verlag, Berlin

A „Porlasztás részecskeárammal” című sorozatnak ez az első kötete, amely e témában az első összefoglaló igényű mű, az egykomponensű szilárdtestek fizikai porlasztásával foglalkozik.

A részecske porlasztás technikája a múlt században nyert alapokat az izzólámpák kifejlesztésével. Ez a tudomány terület igen nagy érdeklődésre tart számot mind a mai napig, s nyilvánvalóan fog a jövőben is, hiszen sok olyan alap és alkalmazott kutatással kapcsolatos, mely a természet jobb megismerésének letéteményese. Ilyenek a fémtan, anyaganalízis, vékonyréteg technika, rétegfelvitel technika, fizikai kémia, vákuumtechnika, felületfizika, elektronmikroszkópia, atom dinamika, sugárzási károsodás vizsgálat, ion implantáció, plazmafizika stb. S széles körű kapcsolódás révén válhat ez a könyv kutatók, alkalmazók, tanárok és diákok számára fontos eszközzé a porlasztás tudományának megértésében és a porlasztás hasznosításában.

Ez a kötet mindamelllett elsősorban hozzáértők érdeklődésére tarthat számot, noha a bő hivatkozás jegyzék és a szerzői index jól segíti a járatlan olvasót is a tájékozódásban.

A sorozat ezen első kötete először egy általános áttekintést ad a témáról, majd két fejezet az elméleti kutatások eredményeit öleli át amorf, polikristályos és egykristályos targeteken. Az utolsó két fejezet kísérleti eredmények és következtetések bemutatását tűzte ki célul.

R. Behrisch, a kötet szerkesztője maga is évtizedek óta foglalkozik a porlasztás elméletével és gyakorlatával, általános áttekintést nyújtó első fejezete a porlasztás folyamatának fizikai megértése szempontjából méri fel napjaink eredményeit.

P. Sigmund, a jelen kor legnevesebb porlasztás-teoretikusa a második fejezetet kapta, ahol rövid történeti áttekintése után amorf anyagokban lezajló porlasztás indukálta folyamatok analitikus közelítésének leírására tér rá. A fizikai tartalom sajnálatosan elvész nagy matematikai apparátus alkalmazásával.

A harmadik fejezet M. T. Robinson része, aki a modellezés szakértője. Sok modell példával illusztrálva vezeti be a különböző másodlagos jelenségek vizsgálatának lehetőségeit.

A kísérleti eredményekkel foglalkozó negyedik fejezet H. H. Andersen és H. L. Bay munkája, akik a különböző paraméterek hatását mutatják be a porlasztási hozamra, sok-sok mérési példával.

Az utolsó fejezetet H. E. Roosendal írta, aki főleg egykristályok kísérleti ion bombázásával foglalkozik, s a hozamok szögeloszlását és kristály orientáció hatását vizsgálja. Érdekes bár kérdéses próbálkozás a kristály felületi amorfizációját a target fűtésével próbálja enyhíteni.

Nagy érdeklődéssel várjuk a sorozat következő, második kötetét, amely többek között a több komponensű targetek bombázásával fog foglalkozni, s a befejező, harmadik kötetet, amely egyebek mellett az alkalmazási lehetőségeket fogja áttekinteni.

Dr. Giber János

**E. Taglaner, W. Heiland (ed.): Inelastic Particle — Surface Collisions
Springer-Verlag, Berlin**

A részecskék és fotonok kölcsönhatása szilárdtestfelületekkel a jelenségek leírása szempontjából interdiszciplináris jellegű. Ennek megfelelően az egyes kölcsönhatások tanulmányozását a szilárdtestfizika, a felületfizika és atomfizika napjainkban született eredményei elősegítik, illetőleg az említett területek is felhasználnak az ion-felület kölcsönhatások vizsgálata során elért eredményeket, illetve felületanalitikai módszereket. Gyakorlati szempontból rendkívül fontos pl. a felületi analitikai módszerek felhasználása a katalízis, a félvezetőgyártás, a magfúziós kutatások területén; a porlasztás vagy sugárkárosodás jelensége vizsgálatának elméleti és kísérleti eredményei jelentős szerepet játszanak a félvezető eszközök stabilitása a fúziós reaktorok fizikája szempontjából.

„A rugalmatlan részecske-felület ütközések” című könyv a „Third International Workshop on Inelastic Ion-Surface Collisions”-on elhangzott 14 összefoglaló jellegű előadás, valamint néhány rövidebb előadás anyagát tartalmazza. A könyv öt fejezetre oszlik. Az első fejezet az ionbombázás hatására létrejövő másodlagos elektronemisszió elméleti és kísérleti kérdéseivel foglalkozik, beleértve a lassú nemesgáz ionok által okozott potenciál-emisszió esetét is. Tárgyalja a targetben lejátszódó ionizációs ütközéseket és az ezekben keletkező elektronok mozgását és fékeződését, illetve a szekunder elektronok a felületi potenciálgáton át történő távozását, az ion indukált Auger-emissziós kísérleteket.

A második fejezet az elektron- és fotonbombázás által ionkristályokon stimulált deszorpció (ESD, PSD) legújabb elméleti és kísérleti vizsgálatait ismerteti, kitérve a módszerek felületi analitikai eszközként való alkalmazására.

Ezt az ionbombázás hatására létrejövő elektron átadással járó folyamatok tárgyalása követi. Megismerkedhetünk belőle az elektronbefogással és elvesztéssel járó folyamatok egy elméleti modelljével és kísérleti alkalmazásával. Ezekben a folyamatokban a target fölén keresztül mozgó primer ion magával ragad néhány target elektront, amelyek egy kvázi folytonos spektrumú metastabil állapotba kerülnek. A kísérletekben a targetből a primer ionokkal egyirányban kilépő elektronok sebesség- (energia-) eloszlását regisztrálják. Ez a fejezet foglalkozik még a gázfázisú ion-molekula ütközésekben lejátszódó ionizációs folyamatokkal, illetőleg plazma effektusokkal is.

A negyedik fejezet az ion-felület szórásban keletkező polarizált fény emissziós kísérleteket ismerteti. A bemutatott eredmények kvalitatív módon alátámasztják az elektronsűrűség modellt.

Végül az ötödik fejezetben a porlasztás és felületi ionszórás során bekövetkező gerjesztésekkel és ionizációval, a visszalökődött atomok energiaeloszlásával foglalkozik. Az itt ismertett elméleti és kísérleti eredmények elsősorban a SIMS-el foglalkozók számára fontosak, mivel betekintést engednek a szekunder ionok keletkezéséhez vezető folyamatok leírásában.

A közölt cikk megértéséhez szükséges előzetes ismeretanyag változó. Általában az illető területet akár csak érintőlegesen ismerő szakemberek számára is a kötet rendkívül informatív: kézikönyv jelleggel használható állandó referencia forrás lehet.

Dr. Giber János

Bruce J. West: On the Simpler Aspects of Nonlinear Fluctuating Deep Water Gravity Waves (Weak Interaction Theory)

Lecture Notes in Physics, Vol. 146.

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981

A nagyterjedésű víz (folyadék) felületén kialakuló és tovaterjedő hullámok tulajdonságai sok paramétértől függenek: a nehézségi erőtértől, a felületi feszültségtől, a peremfeltételektől (vízmélységtől) és nem utolsósorban a gerjesztés módjától. Az óceánok felszínének mozgása és a „gerjesztő” szél kölcsönhatásának leírására nem is alakult ki egységes álláspont: egyes kutatók szerint a kölcsönhatás nem-lineáris ugyan, de (klasszikus értelemben) determinisztikus; más kutatók szerint a szél hullámkeltése nem írható le determinisztikusan: az óceán felszíne a levegőáramlás turbulens fluktuációira sztochasztikusan válaszol, és ilyen esetben a folyadékfelszín (mechanikai) tulajdonságai is sztochasztikusak.

A szerző is ezt az utóbbi felfogást vallja. Ezért választja az Euler—Bernoulli-féle leírás helyett a Hamilton-formalizmust a folyadékfelszín dinamikájának a leírására, minthogy a Hamilton-féle leírásmód a nem-determinisztikus áramlásokra könnyen általánosítható.

A könyv témája tehát: a turbulens levegőáramlás hatására kialakuló tengerhullámok determinisztikus és sztochasztikus leírása. A tárgyalásmód matematikai szempontból elegáns, fizikai szempontból pedig nem csupán azért tanulságos, mert a szerző — megfelelő bevezetés után — áttekinti a témában elért legújabb eredményeket is, hanem azért is, mert a módszer — mutatis mutandis — más nem-lineáris fluktuációk leírására is alkalmazható. Íme néhány fejezetcím: Rezonáns instabilitások és a nem-lineáris Schrödinger-egyenlet. A Hamilton-formalizmus Kolmogorov-féle módosítása. Stacionárius lineáris hullámtér. A gravitációs tengerhullámok instabilitása. A lineáris sztochasztikus differenciálegyenlet. Nem-homogén transzportegyenletek.

A szerző a könyv utolsó fejezetében (Areas for Further Study) rövid és érdeklődéskeltő áttekintést ad a tématerület megoldandó problémáiról, egyúttal sejtetni enged a fejlődés várható irányát.

A bevezetőben a szerző viszonylag hosszan apologizál: megértést kér az óceanográfusoktól, amiért nem tárgyalja pl. a gyakorlati szempontból nem kevésbé fontos erős nem-lineáris effektusokat, a hullám-átborulásokat stb. A szerzőnek azonban nincsen oka „magyarázkodásra”. A kiválasztott anyag — egyébként egyetlen posztgraduális szemeszter előadásainak bővített anyaga — egységes egészet alkot, a tárgyalásmód világos, jól áttekinthető, a példák tanulságosak. (Talán a cím nyomdai szedése adott indokot az apológiára: a címnek „Deep Water Gravity Waves” része olyan nagy betűkkel van szedve, hogy a többi — nem kevésbé lényeges, a tárgyalásmódra utaló — része a címnek csak alaposabb odafigyelés esetén tűnik szembe.)

Szabó János

E. Lohrmann: Hochenergiephysik
Springer-Verlag, 1981

A szerző, aki a hamburgi egyetem professzora, mintegy 250 oldalon ismerteti a nagyenergiájú fizika, vagy másnéven részecskefizika alapfogalmait és legújabb eredményeit. Az első fejezetben egy általános, kvalitatív összefoglalását adja e területnek, majd később három fejezetben elmélyíti az első fejezetben megismerteket. A három, részleteket tartalmazó fejezet kölcsönhatástípusok szerint ismerteti meg bennünket a részecskefizikával: a második fejezet az elektromágneses, a harmadik az erős, a negyedik pedig a gyenge kölcsönhatások körébe tartozó jelenségeket tárgyalja. Külön figyelemmel foglalkozik a legfontosabb idevágó matematikai ismereteket.

A könyv — amely feltételezi a kvantummechanika, az atomfizika és a magfizika egyetemi szintű ismeretét — felsőéves egyetemi hallgatóknak szól, de haszonnal forgathatják olyan fizikusok is, akik nem szakemberei ennek a területnek.

A könyvre jellemző, hogy szerencsés módon összekapcsolja az elméleti és a kísérleti aspektusokat, megadván a legszükségesebb elméleti formalizmust, de ugyanakkor nemcsak a legfontosabb kísérleti eredményeket, hanem — legalábbis fő vonalakban — az alapvető kísérletek elrendezését is.

Kiss Dezső

M. Toda: Theory of Nonlinear Lattices

**Springer Series in Solid State Sciences 20. Editors: M. Cardona, P. Fulde, H.-J. Queisser
Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1981**

A könyv a nemlineáris erők útján kölcsönható részecskékből felépített rácsban kialakuló mozgásokkal, hullámokkal foglalkozik. Központi helyet foglal el a könyvben az az eset, amikor a közvetlen szomszédok kölcsönhatása exponenciális függvénnyel írható le.

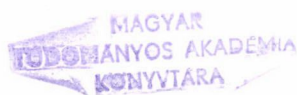
Az első fejezetben a szerző történelmi áttekintés után a rácsokban és kontinuumokban kialakuló mozgásokat vizsgálja és a további tárgyaláshoz szükséges alapfogalmakat vezeti be. A második fejezetben azt az esetet tárgyalja részletesen, amikor a rács részecskéinek kölcsönhatása exponenciális függvénnyel írható le. Kimutatja, hogy ebben az esetben több megmaradó mennyiség létezik, ennek következtében egy ilyen rács mozgásegyenlete integrálható lehet. A 3., 4. és 5. fejezetben különböző esetekben meghatározza a megmaradó mennyiségeket és különböző kezdeti feltételek mellett vizsgálja a kialakuló mozgásokat. A tárgyalást 10 Függelék egészíti ki.

A könyv ezt a modern szilárdtest-fizikában és a térelméletben egyre fontosabbá váló kérdéskört a matematikai fizika módszereivel tárgyalja, nem tér ki a konkrét alkalmazásokra.

Ez az igen jól megírt könyv elsősorban a matematikai fizikával foglalkozó kutatók számára ajánlható, áttekintése hasznos, azonban az elméleti szilárdtest-fizikus és a térelmélettel foglalkozó kutatók számára is.

S. T.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat nyomdába érkezett: 1982. III. 4. — Terjedelem: 9,8 (A/5) iv
82-1094 — Szegedi Nyomda — Felelős vezető: Dobó József igazgató



HŐKEZELÉS HATÁSA A FÉMEK HIBASZERKEZETÉRE

Szerkesztette:

KOVÁCS ISTVÁN

<i>Honyek Gyula</i> : A rekrisztallizáció hajtó és fékező erői	501
<i>Rajkovits Zsuzsa</i> : Primer rekrisztallizáció	513
<i>Kovácsné Csetényi Erzsébet</i> : Kismennyiségű adalékok hatása a megújulásra és rekrisztallizációra	527
<i>Honyek Gyula</i> : Kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációja	537
<i>Juhász András</i> : Nagyszögű szemcsehatárok mozgása	549
<i>Illy Judit</i> : Szekunder rekrisztallizáció	561
<i>Tasnádi Péter</i> : Dinamikus megújulás és újrakristályosodás	575
<i>Morlin Zoltán</i> : Kristálystruktúrák csoportelmélete II. Tércsoportok	591

KÖNYVISMERTETÉS

<i>D. Jagonitzer</i> (ed.): Complex Analysis, microlocal Calculus and Relativistic Quantum Theory	607
<i>Peter Kramer, Marcos Saraceno</i> : Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics	608
<i>R. Behrisch</i> : Sputtering by Particle Bombardment	608
<i>E. Taglaner, W. Heiland</i> (ed.): Inelastic Particle—Surface Collisions	609
<i>Bruce J. West</i> : On the Simpler Aspects of Nonlinear Fluctuating Deep Water Gravity Waves (Weak Interaction Theory)	610
<i>E. Lohrmann</i> : Hochenergiephysik	610
<i>M. Toda</i> : Theory of Nonlinear Lattices	611

A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXIX. KÖTETÉNEK

TÁRGYMUTATÓJA

<i>Zsoldos Lehel</i> : EXAFS: szerkezetvizsgálat a röntgen abszorpció él kiterjedt finomszerkezeté alapján.....	1
<i>Szabó János</i> : A Zemplén-tétel	17
Symbols, Units and Nomenclature in Physics	25
<i>Fái György</i> : Nehéz-ion reakciók kollektív és egy-részecske aspektusai	93
<i>Kiss-Tóth Tibor</i> : Mértékelméletek topológikusan stabil, statikus megoldásainak vizsgálata	143

SZILÁRDSÁGNÖVELŐ MECHANIZMUSOK FÉMEKBEN

<i>Kovács István</i> : A fémek képlékeny alakváltozása és szilárdsága	187
<i>Vörös György és Kovács István</i> : Felületcentrált köbös egykristályok alakítási keményedése ..	201
<i>Juhász András</i> : Tércentrált köbös fémek alakítási keményedése	215
<i>Tasnádi Péter és Rajkovits Zsuzsa</i> : A szemcseszerkezet szilárdságnövelő hatása	235
<i>Rajkovits Zsuzsa és Tasnádi Péter</i> : A szubszerkezetek szilárdságnövelő hatása	255
<i>Bérces György</i> : Befagyasztási keményedés	287
<i>Urgár Tamás és Honyek Gyula</i> : Szilárdoldatos keményedés	299
<i>Lendvai János</i> : Kiválósos keményedés	329

*

<i>Somogyi Mária</i> : $A^{\text{III}}-B^{\text{V}}$ alapú MOS rendszerek	351
<i>N. Vermes</i> : International Physics Competitions. I—XI. 1967—1979. (Preface <i>R. Kunfalvi</i>) ...	407
<i>Bakos József és Ignác Péter</i> : Lézeres nemlineáris plazmadiagnosztika	461
<i>Szabó S. András</i> : Bórmeghatározás prompt neutronaktivációval	487

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Heisenberg és W. Pauli</i> : A hullámmezők kvantumdinamikája	263
<i>W. Heisenberg és W. Pauli</i> : A hullámmezők kvantummechanikája.....	375
<i>W. Heisenberg és W. Pauli</i> : Hullámmezők kvantumelmélete	529

A IUPAP HÍREI

List of IUPAP conferences	551
---------------------------------	-----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>A. Benninghoven, C. A. Evans, R. A. Powell, R. Shimizu, H. A. Storms</i> (ed.-s): Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS II	85
<i>H. C. Freyhardt</i> (ed.): Crystals 2. Growth and Properties	85
<i>T. S. Sørensen</i> (ed.): Dynamics and Instability of Fluid Interfaces	86
<i>Landolt—Börnstein</i> : Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology	87
<i>Landolt—Börnstein</i> : Absorption Equilibria of Gases in Liquids of High Vapour Pressure	88
<i>Landolt—Börnstein</i> : Magnetic Properties of Free Radicals	88
<i>E. Gerlach, P. Grosse</i> (ed.-s): The Physics of Selenium and Tellurium	89
<i>David Park</i> : Classical Dynamic and its Quantum Analogues	90
<i>H. L. Schmidt</i> : Axiomatic Characterisation of Physical Geometry	90
<i>B. M. Fraeijs de Veubeke</i> : A Course in Elasticity	91
<i>G. I. Marchuk, G. A. Mikhailov, M. A. Nazaratiev, R. A. Darbinjan, B. A. Kargin, B. S. Elepov</i> : The Monte Carlo Methods in Atmospheric Optics	91

<i>A. Pekalski and J. Pistawa: Modern Trends in the Theory of Condensed Matter</i>	179
<i>Kiss László: Az elektrokémiai fémoldódás kinetikája</i>	180
<i>F. Bauer—O. Betancourt—P. Garabedian: A Computational Method in Plasma Physics</i>	180
<i>F. Durst, B. E. Launder, F. W. Schmidt, J. H. Whitelaw: Turbulent Shear Flows I</i>	181
<i>H. Cabannes, M. Hoot, V. Rusanov: Sixth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics</i>	182
<i>M. Louterborn: Cavitation and Inhomogenities in Underwater Acoustics</i>	182
<i>J. R. Smith (ed.): Theory of Chemisorption</i>	283
<i>J. M. André, J. L. Bredas, J. Delhalle, J. Ladik, G. Leroy, C. Moser (ed.-s): Recent Advances in the Quantum Theory of Polymers</i>	284
<i>Wigner Jenő: Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában</i>	285
<i>G. A. Agoston: Color Theory and its Application in Art and Design</i>	286
<i>H. Haken—H. C. Wolf: Atom- und Quantenphysik</i>	477
<i>M. Schlenker, M. Fink, J. P. Goodgebauer (ed.-s): Imaging Processes and Coherence in Physics</i>	478
<i>M. S. Feld and S. Lekhtov (ed.-s): Coherent and Nonlinear Optics</i>	478
<i>R. Pratesi and C. A. Sacchi (ed.-s): Lasers in Photomedicine and Photobiology</i>	479
<i>Yu. I. Ostronsky, M. M. Butusov, G. V. Ostronskaya: Interferometry by Holography</i>	479
<i>C. Edwards (ed.): Gravitational Radiation, Collapse Objects and Exact Solutions</i>	481
<i>G. F. Bertsch and D. Kurath (ed.-s): Nuclear Spectroscopy</i>	482
<i>Reiner Bass: Nuclear Reactions with Heavy Ions</i>	482
<i>W. v. Oertzen (ed.): Deep-Inelastic and Fusion Reactions with Heavy Ions</i>	483
<i>J. L. Alonso, R. Tarrach (ed.-s): Quantum Chromodynamics</i>	484
<i>Jendzrej Sniatycki: Geometric Quantization and Quantum Mechanics</i>	484
<i>H. A. Hill and W. A. Dziembowski (ed.-s): Nonradial and Nonlinear Stellar Pulsation</i>	485
<i>Landolt—Börnstein (New Series I/9a): Scattering of Elementary Particles: NN and KN</i>	486
<i>I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein, E. A. Yukov: Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines</i>	557
<i>S. Grossmann: Mathematischer Einführungskurs für die Physik</i>	557
<i>W. K. Bühler: GAUSS — A Biographical Study</i>	558
<i>W. Zawadzki (ed.): Narrow Gap Semiconductors</i>	558
<i>D. C. Mattis: The Theory of Magnetism I</i>	559
<i>Ola Bratelli—Derek W. Robinson: Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II</i>	560
<i>S. A. Losev: Gázdinamikus lézer</i>	560
<i>W. Demtröder: Laser Spectroscopy</i>	561
<i>T. Moriya (ed.): Electron Correlation and Magnetism in Narrow-band Systems</i>	561
<i>S. Chikazumi, N. Miura (ed.-s): Physics in High Magnetic Fields</i>	562
<i>D. L. MacAdam: Color Measurement</i>	563
<i>Evva Ferenc: A fotográfiai rejtett kép</i>	563
<i>Landolt—Börnstein: Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology</i>	564
<i>Landolt—Börnstein: III. Kristály- és szilárdtestfizika. 12b. Spinelek, vasoxidok</i>	564
<i>J. P. Harnad and S. Snider (ed.-s): Geometrical and Topological Methods in Gauge Theories</i>	565
<i>D. F. Gray and J. L. Linsky (ed.-s): Stellar Turbulence</i>	566
<i>B. R. Nag: Electron Transport in Compound Semiconductors</i>	566
<i>Ruggero Maria Santilli: Foundations of Theoretical Mechanics I</i>	567
<i>K. Osterwalder (ed.): Mathematical Problems in Theoretical Physics</i>	568
<i>A szilárdtestkutatás újabb eredményei. 9. kötet. Anyagtudomány és gyakorlat</i>	568
<i>J. Ehlers, K. Hepp, R. Kippenhahn, H. A. Heidenmüller, J. Zittartz (ed.-s): Neutron Spin Echo</i>	569
<i>M. Boiti, F. Pempinelli, G. Soliani (ed.-s): Nonlinear Evolution Equations and Dynamical Systems</i>	570
<i>P. W. Hawkes (ed.): Computer Processing of Electron Microscope Images</i>	570
<i>Bata Lajos: Folyadékkristályok. A szilárdtestkutatás újabb eredményei. 7. k.</i>	571
<i>D. C. Hanna, M. A. Yuratch, D. Cotter: Nonlinear Optics of Free Atoms and Molecules</i>	571
<i>R. K. Bullogh and P. J. Candrey (ed.-s): Solitons</i>	573
<i>W. Helfrich, G. Heppke (ed.-s): Liquid Crystals of one- and two dimensional order</i>	573

A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXIX. KÖTETÉNEK NÉVMUTATÓJA

<i>Bakos József és Ignácz Péter: Lézeres nemlineáris plazmadiagnosztika</i>	461
<i>Bérces György: Befagyasztási keményedés</i>	287
<i>Fái György: Nehéz-ion reakciók kollektív és egy-részecske aspektusai</i>	93
<i>W. Heisenberg és W. Pauli: A hullámmezők kvantumdinamikája</i>	263
<i>W. Heisenberg és W. Pauli: A hullámmezők kvantummechanikája</i>	375
<i>W. Heisenberg és W. Pauli: A hullámmezők kvantumelmélete</i>	529
<i>Honyek Gyula, I. Ungár Tamás</i>	299
<i>Ignácz Péter, I. Bakos József</i>	461
<i>Juhász András: Tércentrált köbös fémek alakítási keményedése</i>	215
<i>Kiss-Tóth Tibor: Mértékelméletek topologikusan stabil, statikus megoldásainak vizsgálata</i>	143
<i>Kovács István: A fémek képlékeny alakváltozása és szilárdsága</i>	187
<i>Kovács István, I. Vörös György</i>	201
<i>Kunfalvi R., I. Vermes</i>	407
<i>Lendvai János: Kiválósos keményedés</i>	329
<i>Pauli W., I. Heisenberg</i>	263, 375, 529
<i>Rajkovits Zsuzsa, I. Tasnádi</i>	235
<i>Rajkovits Zsuzsa és Tasnádi Péter: A szubszerkezetek szilárdságnövelő hatása</i>	255
<i>Somogyi Mária: A^{III}—B^{V} alapú MOS rendszerek</i>	351
<i>Szabó János: A Zemplén-tétel</i>	17
<i>Szabó S. András: Bórmeghatározás prompt neutronaktivációval</i>	487
<i>Tasnádi Péter és Rajkovits Zsuzsa: A szemcseszerkezet szilárdságnövelő hatása</i>	235
<i>Tasnádi Péter, I. Rajkovits Zsuzsa</i>	255
<i>Ungár Tamás és Honyek Gyula: Szilárdoldatos keményedés</i>	299
<i>Vermes, N.: International Physics Competitions. I—XI. 1967—1979. (Preface R. Kunfalvi)</i>	407
<i>Vörös György és Kovács István: Felületcentrált köbös egykristályok alakítási keményedése</i>	201
<i>Zsoldos Lehel: EXAFS: szerkezetvizsgálat a röntgen abszorpció él kiterjedt finomszerkezete alapján</i>	1

307-226

TÁRGYMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 30. kötetéhez

<i>Ungár Tamás</i> : Metastabil fázisok keletkezése, stabilitása és hatása a fizikai tulajdonságokra Al—Zn—Mg ötvözetekben	1
<i>Groma Géza</i> : Fázisátalakulások a nemesíthető, közepes szilárdságú AlZnMg ötvözetekben	103
<i>Bata Lajos</i> : Nematikus és szmektikus-A szerkezetű folyadékkristályok mikrodinamikája	187
<i>Forgács Péter</i> : Téridő szimmetriák a mértékelméletekben	249
<i>Angster Judit—Miklós András—Tarnóczy Tamás</i> : A zengőszobai mérések általános problémái	287
<i>Szlachányi Kornél</i> : A kvark-gluon anyag termodinamikája	311
<i>Kovács István</i> : Hibaeltűnési folyamatok fémekben	375
<i>Bérces György</i> : Ponthiba eltűnés befagyasztott fémekből	379
<i>Vörös György</i> : Megújulási folyamatok besugárzott fémekben	403
<i>S. Tóth László</i> : Ponthiba eltűnési folyamatok alakított fémekben	417
<i>Lendvai János</i> : Deformációs tárolt energia	435
<i>Ungár Tamás</i> : Megújulási folyamatok fémekben	447
<i>Morlin Zoltán</i> : Kristálystruktúrák csoportelmélete I. Pontcsoportok	465
<i>Honyek Gyula</i> : A rekrisztallizáció hajtó és fékező erői	501
<i>Rajkovits Zsuzsa</i> : Primer rekrisztallizáció	513
<i>Kovácsné Csetényi Erzsébet</i> : Kismennyiségű adalékok hatása a megújulásra és rekrisztallizációra	527
<i>Honyek Gyula</i> : Kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációja	537
<i>Juhász András</i> : Nagyszögű szemcsehatárok mozgása	549
<i>Illy Judit</i> : Szekunder rekrisztallizáció	561
<i>Tasnádi Péter</i> : Dinamikus megújulás és újrakristályosodás	575
<i>Morlin Zoltán</i> : Kristálystruktúrák csoportelmélete II. Tércsoportok	591

Könyvismertetések

<i>F. Beleznyai, G. Ferenczi, J. Giber</i> (ed.-s): New Developments in Semiconductor Physics	177
<i>K. A. Müller, H. Thomas</i> : Structural Phase Transitions I. The Computer in Optical Research	177
Inverse Scattering Problems in Optics	179
<i>Schlenker M., Fink M., ... Wade R. H.</i> (ed.-s): Imaging Processes and Coherence in Physics	179
Coherent and Nonlinear Optics. Recent Advances	180
<i>Yu. N. Molin, K. M. Saliknov, K. J. Zamarev</i> : Spin Exchange	181
<i>Dobrinski—Vogel</i> : Physik für Ingenieure	182
<i>Szabó Zoltán</i> : Szerkezet és reakcióképesség	183
<i>H. Walther K. W. Rothe</i> (ed.-s): Laser spectroscopy IV	184
<i>R. Hachstrasser, W. Kaiser, C. V. Shank</i> (ed.-s): Picosecond Phenomena II	184
<i>W. Schuman—M. Dubus</i> : Holographic Interferometry	185
<i>D. H. Mayer</i> : The Ruella-Araki Transfer Operator in Classical Statistical Mechanics	279
<i>L. Garrido</i> (ed.): Systems Far from Equilibrium	279
<i>Ju. I. Szirotin, M. P. Saszkoljszkaja</i> : Osznovü krisztallofiziki.	279
<i>R. Glowinski and J. L. Lions</i> (ed.-s): Computing Methods in Applied Sciences and Engineering	280
<i>Neumann János</i> : A kvantummechanika matematikai alapjai	281
<i>R. F. Willis</i> : Vibrational Spectroscopy of Adsorbates	281
<i>J. Brey—R. B. Jones</i> (editors): Critical Phenomena	282
<i>L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw</i> (editors): Turbulent Shear Flows 2	282

<i>Enrique Sanchez—Palenzia: Non-Homogeneous Media and Vibration Theory</i>	282
<i>P. A. Libby—F. A. Williams (editors): Turbulent reacting Flows</i>	283
<i>W. Nörenberg—H. A. Heidenmüller: Introduction to the Theory of Heavy-Ion Collisions</i>	284
<i>Frederik W. Wiegel: Fluid Flow through porous Macromolecular Systems</i>	284
<i>W. C. Reynolds, R. W. MacCormack (editors): Seventh International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics</i>	285
<i>J. Jimenez (ed.): The Role of Coherent Structures in Modelling Turbulence and Mixing</i>	286
<i>H. L. Swinney and J. P. Gollub (editors): Hydrodynamics Instabilities and the Transition to Turbulence</i>	365
<i>A. Ben-Shaul, Y. Haas, K. L. Kompa, R. D. Levine: Lasers and Chemical Change</i>	366
<i>W. O. N. Guimaraes, C.—T Lin A. Mooradian (ed.-s): Lasers and Applications</i>	366
<i>D. C. Brown: High-Peak—Power Nd: Glass Laser Systems</i>	367
<i>J. Bernasconi and T. Schneider (ed.-s): Physics in one Dimension</i>	367
<i>W. A. Phillips (ed.): Amorphous Solids. Low-Temperature Properties</i>	368
<i>F. Yonezawa: Fundamental Physics of Amorphous-Semiconductors</i>	368
<i>C. Kuncz (ed.): Synchrotron Radiation. Techniques and Applications</i>	369
<i>P. Goodman (ed.): Fifty Years of Electron Diffraction</i>	369
<i>Peter Day (editor): Emission and Scattering Techniques</i>	370
<i>D. Jagonitzer (ed.): Complex Analysis, microlocal Calculus and Relativistic Quantum Theory</i>	607
<i>Peter Kramer, Marcos Saraceno: Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics</i>	608
<i>R. Behrisch: Sputtering by Particle Bombardment</i>	608
<i>E. Taglaner, W. Heiland (ed.): Inelastic Particle-Surface Collisions</i>	609
<i>Bruce J. West: On the Simpler Aspects of Nonlinear Fluctuating Deep Water Gravity Waves (Weak Interaction Theory)</i>	610
<i>E. Lohrmann: Hochenergiephysik</i>	610
<i>M. Toda: Theory of Nonlinear Lattices</i>	611

NÉVMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 30. kötetéhez

<i>Angster Judit—Miklós András—Tarnóczy Tamás: A zengőszobai mérések általános problémái</i>	287
<i>Bata Lajos: Nematikus és szmektikus-A szerkezetű folyadékkristályok mikrodinamikája</i>	187
<i>Bérczes György: Ponthiba eltűnés befagyasztott fémekből</i>	379
<i>Forgács Péter: Téridő szimmetriák a mértékelméletekben</i>	249
<i>Groma Géza: Fázisátalakulások a nemesíthető, közepes szilárdságú AlZnMg ötvözetekben</i>	103
<i>Honyek Gyula: A rekrisztallizáció hajtó és fékező erői</i>	501
<i>Honyek Gyula: Kétfázisú ötvözetek rekrisztallizációja</i>	537
<i>Illy Judit: Szekunder rekrisztallizáció</i>	561
<i>Juhász András: Nagyszögű szemcsehatárok mozgása</i>	549
<i>Kovács István: Hibaeltűnési folyamatok fémekben</i>	375
<i>Kovácsné Csetényi Erzsébet: Kismennyiségű adalékok hatása a megújulásra és rekrisztallizációra</i>	527
<i>Lendvai János: Deformációs tárolt energia</i>	435
<i>Miklós András lásd Angster Judit</i>	
<i>Morlin Zoltán: Kristálystruktúrák csoportelmélete I. Pontcsoportok</i>	465
<i>Morlin Zoltán: Kristálystruktúrák csoportelmélete II. Tércsoportok</i>	591
<i>Rajkovits Zsuzsa: Primer rekrisztallizáció</i>	513
<i>S. Tóth László: Ponthiba eltűnési folyamatok alakított fémekben</i>	417
<i>Szlachányi Kornél: A kvark-gluon anyag termodinamikája</i>	311
<i>Tarnóczy Tamás lásd Angster Judit</i>	
<i>Tasnádi Péter: Dinamikus megújulás és újrakristályosodás</i>	575
<i>Ungár Tamás: Metastabil fázisok keletkezése, stabilitása és hatása a fizikai tulajdonságokra Al-Zn-Mg ötvözetekben</i>	1
<i>Ungár Tamás: Megújulási folyamatok fémekben</i>	447
<i>Vörös György: Megújulási folyamatok besugárzott fémekben</i>	403

